



Modélisation multi-échelle de l'effet de la structure héritée sur la déformation des plaques continentales

Mickael Knoll

► To cite this version:

Mickael Knoll. Modélisation multi-échelle de l'effet de la structure héritée sur la déformation des plaques continentales. Géologie appliquée. Université Montpellier II - Sciences et Techniques du Languedoc, 2009. Français. NNT: . tel-00369463

HAL Id: tel-00369463

<https://theses.hal.science/tel-00369463>

Submitted on 19 Mar 2009

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Université de Montpellier II
Sciences et Techniques du Languedoc

Ecole Doctorale SIBAGHE

(Systèmes Intégrés en Biologie, Agronomie, Géosciences, Hydrosociences, Environnement)

Thèse

Pour obtenir le grade de

Docteur de l'Université de Montpellier II

Discipline : Structure et Dynamique du Manteau

Présentée par

Mickaël Knoll

le 13 janvier 2009

**Modélisation multi-échelle de l'effet de la structure héritée sur la
déformation des plaques continentales**

Jury :

M. Jean Chéry
Mme Andréa Tommasi
M. Roland Logé
M. Olivier Castelnau
M. Edouard Kaminski

Président
Directeur de thèse
Directeur de thèse
Rapporteur
Rapporteur

Remerciements

Cette thèse a été réalisée en collaboration entre le laboratoire Géosciences Montpellier et le Centre de Mise en Forme des Matériaux (CEMEF) des Mines ParisTech.

Mes premiers remerciements vont naturellement à Andréa Tommasi et Roland Logé qui m'ont encadré durant ces trois années. Merci à vous deux pour votre disponibilité, vos conseils et pour votre confiance malgré les durs moments que je vous ai fait endurer.

Ma plus grande gratitude va à Javier Signorelli, pour son aide indispensable au cours de cette thèse ainsi qu'à Alain Vauchez pour avoir pris le temps de répondre à mes questions. Je vous remercie sincèrement tous les quatre pour les discussions que nous avons eues, ce fût un plaisir de travailler avec vous pendant ma thèse.

Mes remerciements vont ensuite à Jean Chéry qui a présidé mon jury ainsi qu'à Olivier Castelnau et Edouard Kaminski qui ont accepté d'être rapporteurs de ma thèse. Je les remercie vivement pour l'intérêt qu'ils ont porté à mon travail.

Je remercie l'ensemble du personnel du CEMEF et de Géosciences Montpellier qui m'ont aidé à un moment ou à un autre dans mon étude, avec une pensée particulière pour Bernadette.

Je souhaite témoigner mon amitié à mes collègues de bureaux avec qui j'ai passé de formidables moments, Ben et Marc à Sophia-Antipolis et, par ordre de passage à Montpellier, Ingrid et Marianne (et Lio) qui m'ont éveillé aux joies de la vie de thésards au début de ce projet, Lyde, Mathieu et Yo qui m'ont supporté pendant la fin de ce travail. A ces derniers viennent s'ajouter tous mes autres collègues Céline, Marie, Mélinda, Nico, Pascal, Sabine pendant mes passages au CEMEF et Bruno, Fab, Flo, Karen, Lara, Magali, Marion (et Aurélien), Mitch, Nico, Philou, Pierre, Rémi, Tom et Tom, Titou, Véro, Vincent à Montpellier.

Finalement un énorme merci à mes parents, mes grands-parents, mon frère et évidemment Manue!

Table des matières

I -Introduction générale.....	1
Références bibliographique	6
 II - Mécanismes de déformations de l'olivine, anisotropie mécanique et modélisation numérique	10
1 Structure et rhéologie de la lithosphère	12
2 Mécanismes de déformation de l'olivine.....	13
2.1 Cristallochimie de l'olivine.....	13
2.2 Comportement mécanique du monocristal d'olivine	15
2.3 Comportement mécanique du manteau lithosphérique	17
3 Intégration de l'anisotropie mécanique.....	20
3.1 Critère d'écoulement – Approche empirique	20
3.2 Critère d'écoulement – Approche cristallographique	22
3.3 Modèles polycristallins	23
3.4 Couplage modèle polycristallins et méthode EF.....	27
3.5 Méthode EF ²	28
4 Conclusion	28
Références bibliographiques	30
 III - Méthodes de couplage FEM / Modèle polycristallin	40
1 Présentation de Forge2005®	41
1.1 Formulation du problème mécanique.....	41
1.2 Discrétisation du problème.....	44
1.2.1 Discrétisation spatiale	44
1.2.2 Discrétisation temporelle	47
1.3 Résolution du système.....	48
2 Présentation du modèle VPSC.....	51
2.1 Equation mécanique monocristalline et polycristalline	51
2.2 Résolution du modèle VPSC.....	56
2.3 Remaillage.....	57
3 Stratégie de couplage EF/VPSC	58
3.1 Présentation	58
3.2 Avantage et inconvénients des couplages fort et faible	59
4 Couplage faible, couplage fort et modèle « découplé ».....	61
4.1 Validation des méthodes de couplage	61
4.2 Choix de la méthode de couplage	65
4.3 Validation du remaillage	68
5 Conclusion	70
Références bibliographiques	72
 IV - A multi-scale approach to model the anisotropic deformation of lithospheric plates soumis à Geochemistry, Geophysics, and Geosystems (G3)	75

V – Multiscale modeling of the effect of preexisting lithospheric-scale wrench faults on the deformation of continental plates <i>en préparation pour Geochemistry, Geophysics, and Geosystems (G3)</i>	109
VI – Crystal-scale control on plate tectonics: anisotropy induced reactivation of lithospheric faults <i>soumis à Nature, en correction</i>	144
VII – Conclusion générale	168
Références bibliographique	172

Introduction générale

De nombreuses études montrent que les structures héritées d'anciens événements tectoniques sont souvent réactivées au cours de nouveaux épisodes de déformations et jouent un rôle prépondérant dans plusieurs processus géologiques. Ceci suggère que le manteau lithosphérique possède une mémoire des déformations qu'il a subies au cours du temps. En effet, l'analyse des grands systèmes de rifts montre que ceux-ci présentent une forte tendance à se former, le plus souvent, parallèlement aux anciennes structures collisionnelles [Vauchez *et al.*, 1997]. Dès 1966, Wilson propose que la localisation, l'initiation et la propagation du système Nord Atlantique sont le fruit de la réactivation de structures préexistantes [Wilson, 1966]. Depuis, ce concept a été repris pour de nombreux systèmes de rifts. Ceci est le cas de systèmes majeurs tels que le rift Est Africain [Ring, 1994], le Rio Grande [Olsen *et al.*, 1987; Wilson *et al.*, 2005], le rift Sud Atlantique [Chang *et al.*, 1992], et le rift Baïkal [Chemenda *et al.*, 2002] mais aussi de structures de plus petite échelle comme le rift d'Algarve au sud du Portugal [Martins *et al.*, 2008], les grabens de Limagne et Roanne dans le Massif Central [Babuska *et al.*, 2002] et de systèmes de failles en Thaïlande [Morley *et al.*, 2004] et au Cambodge [Morley, 2007].

La montée de panaches mantelliques est généralement liés spatialement et temporelle au rifting. Cette observation suggère que les ceux-ci jouent un rôle important dans le processus d'ouvertures continental. [Hill, 1991; Courtillot *et al.*, 1999]. Néanmoins, il existe un paradoxe entre le champ de contraintes axisymétriques provoqué par l'apex d'un panache mantellique et la géométrie planaire du rift. De plus, l'initiation et la propagation homogène de la déformation le long de longues distances ne peuvent pas résulter d'une perturbation locale du champ de contrainte. Il doit donc exister un autre mécanisme permettant d'expliquer un tel guidage mécanique de la déformation.

Par ailleurs, l'influence de structure préexistantes n'est pas limité aux processus de rift puisqu'à partir de corrélations spatiales et temporelles de la déformation dans l'est des Etats-Unis, Tikoff *et al* [Tikoff *et al.*, 2008] ont récemment proposé que le magmatisme basaltique dans les zones de Yellowstone et de Columbia River puisse résulter d'une réactivation transtensionnelle de la zone de cisaillement de l'Est-Idaho plutôt que de l'activité d'un panache mantellique. Des événements magmatiques majeurs en Afrique du Sud, comme les

emplacements de dykes du Zimbabwe et du complexe du Bushveld, ont aussi put être contrôlés par des structures héritées [*Silver et al.*, 2004].

Une réactivation de structures héritées a aussi été proposée pour expliquer la distribution spatiale de la sismicité intraplaque et du magmatisme alcalin [*Sykes*, 1978]. La zone sismique de New Madrid, au sud est des Etats-Unis, par exemple, est située à proximité d'un rift avorté au cours du Neoproterozoïque [*Grana and Richardson*, 1996]. En Europe, on observe aussi une concordance géographique entre structures préexistante et localisation de la sismicité intraplaque, que ce soit le long de failles Hercyniennes majeures comme la zone de cisaillement Armoricaïne, au sud de la Bretagne, ou le Sillon Houiller dans le Massif Central Français [*Mazabraud et al.*, 2005]. Ce même phénomène est observé le long de zones de cisaillement Pan-Africaine au niveau de la marge conjuguée du Nord-Est du Brésil et de l'Afrique [*Bezerra and Vita-Finzi*, 2000; *Attoh et al.*, 2005].

Sur la base d'une corrélation entre anisotropie sismique et structures collisionnelles ou extensionnelles de différents âges dans les plaques continentales, Vauchez et al. [*Vauchez et al.*, 1997; *Vauchez et al.*, 1998] ont proposé que les orientations préférentielles de réseau (OPR) de l'olivine formées lors d'anciens événements tectoniques puis fossilisées dans le manteau lithosphérique soient à l'origine de ce guidage mécanique conduisant à une localisation de la déformation le long de structures héritées. Ces OPR sont à l'origine de l'anisotropie sismique mesurée dans les continents (variation de la vitesse de propagation des ondes sismiques en fonction de la direction de propagation ou de polarisation de ces dernières). Pour tester cette hypothèse, la déformation d'une lithosphère continentale anisotrope en réponse à une tension axisymétrique provoquée par la montée d'un panache a été modélisée en utilisant une approche viscoplastique autocohérente [*Tommasi and Vauchez*, 2001]. Ces modèles ont montrés une déformation plus facile des domaines où les contraintes extensives sont obliques à la structure préexistante. Dans ces domaines, la structure préexistante est réactivée en transtension. Les résultats de cette étude suggèrent que la présence dans le manteau d'une orientation cristallographique de l'olivine héritée d'épisodes de déformation passés crée une forte anisotropie de résistance mécanique des plaques continentales. Toutefois, ces modèles restent limités puisqu'ils ne prennent pas en compte l'évolution des OPR au cours de la déformation.

Les premiers travaux prenant en compte l'influence de l'anisotropie sur la convection ont été menés par [*Richter and Daly*, 1978] en considérant une viscosité isotrope transverse et

l'applique à l'étude du nombre d'onde critique et du nombre de Rayleigh critique. En 1986, Honda poursuit cette étude en utilisant une description basé sur les propriétés d'un milieu stratifié et montre l'influence de l'anisotropie sur la forme des cellules de convection [Honda, 1986]. Néanmoins, ces étapes utilisent une description non-évolutive de l'anisotropie. [Christensen, 1987] est le premier à utiliser une description évolutive de l'anisotropie dans un milieu isotrope transverse qui démontre l'influence de l'anisotropie sur la localisation de la déformation. Plus récemment, [Lev and Hager, 2008] ont proposés un nouveau modèle d'anisotropie évolutive montrant une modification de l'initiation des instabilités de convection et de leur taille.

D'autres modèles ont depuis été développés pour inclure l'anisotropie mécanique induite par les OPR dans un calcul à l'échelle macroscopique mais ceux-ci restent limités à des modèles en 2D [Muhlhaus *et al.*, 2004] ou à des matériaux de haute symétrie cristalline [Pouilloux *et al.*, 2007] et ne prennent pas en compte l'intégralité des composantes de la matrice de viscosité.

Afin de comprendre l'effet de l'anisotropie mécanique engendrée par les OPR d'olivine sur la déformation lithosphérique, il convient de définir un modèle rhéologique polycristallin liant l'état mécanique du grain (microscopique) à l'état mécanique de l'agrégat (macroscopique) et de le lier à une méthode numérique de calcul grande déformations représentative de la lithosphère continentale. Ce type de formalisme a été depuis longtemps étudié en mise en forme des matériaux où la connaissance des effets de l'anisotropie mécanique sur la rhéologie du matériau est nécessaire pour prévoir la forme et les propriétés mécaniques de la pièce finale [Raabe *et al.*, 2002].

Nous avons donc développé un modèles 3D multi-échelles dans lesquels un agrégat de cristaux d'olivine est associé à chaque nœud de u maillage éléments finis (EF) du modèle lithosphérique. Cet agrégat se déforme sous l'effet du champ de vitesse local et, s'il possède une orientation préférentielle de réseau, il va conférer une viscosité anisotrope au milieu, qui est alors intégrée dans le calcul EF. L'utilisation d'une loi rhéologiques multi-échelle adaptée permet de définir intégralement les propriétés mécaniques anisotropes du matériau quelque soit sa symétrie cristalline. De plus, le couplage entre les deux modèles fait que les orientations préférentielles de réseau et donc, l'anisotropie, évoluent au cours de la déformation.

Afin d'appliquer ce formalisme à des modèles géologiques, il est nécessaire de définir une lithosphère continentales présentant plusieurs structures caractérisée par des OPR initiale. Cet

étape est assurée par un mailleur multi-domaine [Bernacki *et al.*, 2008]. Celui-ci définit au sein du maillage EF des limites de zones, en utilisant des fonctions de type *levelset*, autour desquels un raffinement du maillage est exécuté. Cependant, le formalisme EF que nous utilisons est basé sur une description Lagrangienne, ce qui signifie que le maillage EF est lié à la matière. Ce type d'approche peut entraîner une dégénérescence du maillage lors de la simulation de grandes déformations. Une étape de remaillage, autogéré par le modèle EF utilisé, est donc nécessaire pour s'assurer la validité des calculs. Néanmoins, certaines variables microstructurales ne peuvent être transféré de l'ancien au nouveau maillage par le code EF. Une méthode de transport des variables microstructurales est intégrée au modèle 3D multi-échelle [Loge and Chastel, 2006].

Les différentes parties de ce manuscrit présentent le formalisme que nous avons développé et les applications qui en découlent.

La première partie est composée d'un rappel de nos connaissances sur la rhéologie du monocristal et des polycristaux d'olivine ainsi qu'une revue des différentes méthodes permettant la prise en compte de l'anisotropie mécanique utilisées pour l'étude de la mise en forme des matériaux en métallurgie et en sciences de la terre. A l'issue de cette revue, un modèle polycristallin ainsi qu'une méthode numérique permettant la prise en compte de l'anisotropie mécanique dans le manteau lithosphérique et de son évolution au cours de la déformation sont choisis pour la suite de l'étude.

La deuxième partie de ce mémoire présente le formalisme utilisé pour la description mécanique à l'échelle macroscopique et microscopique ainsi que des méthodes de couplage potentielles et de remaillage. Cette description est suivie de la présentation des résultats de validation du modèle.

Le troisième chapitre présente, sous forme d'un article soumis à la revue *Geophysics Geochemistry Geosystems*, l'approche numérique et les résultats obtenus lors de la simulation de la déformation en extension d'une plaque lithosphérique présentant une distribution initiale homogène des OPR d'olivine.. Cette étude permet une meilleure compréhension de l'influence des OPR d'olivine sur la rhéologie d'une plaque lithosphérique.

Le quatrième chapitre présente les résultats obtenus lors des simulations de la déformation extensive d'une plaque lithosphérique contenant une faille décrochante (ou, plus précisément, une zone de cisaillement) d'échelle lithosphérique. Ces modèles sont présentés sous la forme d'un article en phase finale de préparation, qui sera soumis à la revue *Geophysics Geochemistry Geosystems* dans les prochaines semaines. Ils nous éclairent sur l'influence :

- des OPR d'olivine initiales dans la zone héritée ainsi que dans le milieu environnant,
- de l'intensité des OPR d'olivine héritées initiales,
- de l'orientation macroscopique de la zone héritée par rapport à la direction d'extension,

sur la réactivation, c'est à dire la localisation de la déformation dans les structures préexistantes, et sur le régime de déformation dans la zone héritée et à l'extérieur.

Le cinquième chapitre est une synthèse de l'influence de l'anisotropie mécanique due à l'orientation préférentielle des cristaux d'olivine dans le manteau lithosphérique sur la tectonique de plaques à partir de résultats issus de simulation de plaques multi-domaines soumises à des sollicitations d'extensives ou cisailantes. La version révisée de cet article vient d'être soumise à la revue *Nature Géosciences*.

Finalement, une discussion générale des résultats obtenus est suivie des conclusions et perspectives de ce travail.

Références bibliographiques

- Attoh, K., et al. (2005), The role of Pan-African structures in intraplate seismicity near the termination of the Romanche Fracture Zone, West Africa, *Journal of African Earth Sciences*, 43(5), 549-555.
- Babuska, V., et al. (2002), Seismic anisotropy of the French Massif Central and predisposition of Cenozoic rifting and volcanism by Variscan suture hidden in the mantle lithosphere, *Tectonics*, 21(4).
- Bernacki, M., et al. (2008), Level set framework for the numerical modelling of primary recrystallization in polycrystalline materials, *Scripta Materialia*, 58(12), 1129-1132.
- Bezerra, F. H. R., and C. Vita-Finzi (2000), How active is a passive margin? Paleoseismicity in northeastern Brazil, *Geology*, 28(7), 591-594.
- Chang, H. K., et al. (1992), Tectonics and stratigraphy of the East Brazil Rift System - An overview, *Tectonophysics*, 213(1-2), 97-138.
- Chemenda, A., et al. (2002), Three-dimensional laboratory modelling of rifting: application to the Baikal Rift, Russia, *Tectonophysics*, 356(4), 253-273.
- Christensen, U. R. (1987), Some geodynamical effects of anisotropic viscosity, *Geophysical Journal of the Royal Astronomical Society*, 91(3), 711-736.
- Courtillot, V., et al. (1999), On causal links between flood basalts and continental breakup, *Earth and Planetary Science Letters*, 166(3-4), 177-195.
- Grana, J. P., and R. M. Richardson (1996), Tectonic stress within the New Madrid seismic zone, *Journal of Geophysical Research-Solid Earth*, 101(B3), 5445-5458.
- Hill, R. I. (1991), Startin plume and continental break-up, *Earth and Planetary Science Letters*, 104(2-4), 398-416.
- Honda, S. (1986), Strong anisotropic flow in a finely layered asthenosphere, *Geophysical Research Letters*, 13(13), 1454-1457.
- Lev, E., and B. H. Hager (2008), Prediction of anisotropy from flow models: A comparison of three methods, *Geochemistry Geophysics Geosystems*, 9, 13.
- Loge, R. E., and Y. B. Chastel (2006), Coupling the thermal and mechanical fields to metallurgical evolutions within a finite element description of a forming process, *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 195(48-49), 6843-6857.
- Martins, L. T., et al. (2008), Rift-related magmatism of the Central Atlantic magmatic province in Algarve, Southern Portugal, *Lithos*, 101(1-2), 102-124.

- Mazabraud, Y., et al. (2005), Characterisation of the seismological pattern in a slowly deforming intraplate region: Central and western France, *Tectonophysics*, 409(1-4), 175-192.
- Morley, C. K., et al. (2004), Activation of rift oblique and rift parallel pre-existing fabrics during extension and their effect on deformation style: examples from the rifts of Thailand, *Journal of Structural Geology*, 26(10), 1803-1829.
- Morley, C. K. (2007), Variations in Late Cenozoic-Recent strike-slip and oblique-extensional geometries, within Indochina: The influence of pre-existing fabrics, *Journal of Structural Geology*, 29(1), 36-58.
- Muhlhaus, H. B., et al. (2004), Emergent anisotropy and flow alignment in viscous rock, *Pure and Applied Geophysics*, 161(11-12), 2451-2463.
- Olsen, K. H., et al. (1987), Rio-Grande Rift - An overview, *Tectonophysics*, 143(1-3), 119-139.
- Pouilloux, L., et al. (2007), Anisotropic rheology of a cubic medium and implications for geological materials, *Geophysical Journal International*, 170(2), 876-885.
- Raabe, D., et al. (2002), Concepts for integrating plastic anisotropy into metal forming simulations, *Adv. Eng. Mater.*, 4(4), 169-180.
- Richter, F. M., and S. F. Daly (1978), Convection models having a multiplicity of large horizontal scales, *Journal of Geophysical Research*, 83(NB10), 4951-4956.
- Ring, U. (1994), The influence of preexisting structure on the evolution of the Cenozoic Malawi Rift (East-African Rift System), *Tectonics*, 13(2), 313-326.
- Silver, P. G., et al. (2004), Seismic anisotropy, mantle fabric, and the magmatic evolution of Precambrian southern Africa, *South African Journal of Geology*, 107(1-2), 45-58.
- Sykes, L. R. (1978), Intraplate seismicity, reactivation of preexisting zones of weakness, alkaline magmatism, and other tectonism postdating continental fragmentation, *Reviews of Geophysics*, 16(4), 621-688.
- Tikoff, B., et al. (2008), Lithospheric control on the initiation of the Yellowstone hotspot: Chronic reactivation of lithospheric scars, *International Geology Review*, 50(3), 305-324.
- Tommasi, A., and A. Vauchez (2001), Continental rifting parallel to ancient collisional belts: an effect of the mechanical anisotropy of the lithospheric mantle, *Earth and Planetary Science Letters*, 185(1-2), 199-210.
- Vauchez, A., et al. (1997), Why do continents break-up parallel to ancient orogenic belts?, *Terra Nova*, 9(2), 62-66.
- Vauchez, A., et al. (1998), Rheological heterogeneity, mechanical anisotropy and deformation of the continental lithosphere, *Tectonophysics*, 296(1-2), 61-86.

Wilson, D., et al. (2005), Lithospheric structure of the Rio Grande rift, *Nature*, 433(7028), 851-855.

Wilson, J. T. (1966), Did Atlantic close and then re-open?, *Nature*, 211(5050), 676.

Chapitre 2 :

Mécanismes de déformations de l'olivine, anisotropie mécanique et modélisation numérique

Sommaire	10
1 Structure et rhéologie de la lithosphère.....	12
2 Mécanismes de déformation de l'olivine	13
2.1 Cristallochimie de l'olivine	13
2.2 Comportement mécanique du monocristal d'olivine.....	15
2.3 Comportement mécanique du manteau lithosphérique	17
3 Intégration de l'anisotropie mécanique	20
3.1 Critère d'écoulement – Approche empirique	20
3.2 Critère d'écoulement – Approche cristallographique.....	22
3.3 Modèles polycristallins.....	23
3.4 Couplage modèle polycristallins et méthode EF	27
3.5 Méthode EF ²	28
4 Conclusion.....	28
Références bibliographiques	30

L'olivine, qui est le minéral majoritaire du manteau lithosphérique, présente une importante dépendance de ses propriétés mécaniques selon la direction de la sollicitation. Cette anisotropie mécanique a une importante influence sur la rhéologie du matériau. Dans le cas de sollicitations simples, comme l'extension ou la compression uniaxiale, et pour des matériaux isotropes (invariance de la déformation dans toutes les directions), orthotropes (invariance de la déformation selon trois plan orthogonaux) ou transverse isotropes (invariance de la déformation selon un axe de rotation), l'anisotropie mécanique est définie par le rapport entre la déformation maximale et minimale dans le plan normal à la direction de la sollicitation. Pour des symétries plus faibles, ce qui est le cas de l'olivine, qui est un minéral orthorhombique, une autre expression de l'anisotropie mécanique est le développement de déformations cisailantes même pour des sollicitations de type compression ou extension axiale.

La prise en compte de l'anisotropie mécanique lors de simulation de déformation a été initialement introduite pour l'étude de la mise en forme des matériaux métalliques. Dans ce cadre, une description précise du comportement mécanique est essentielle pour la prédiction de la forme finale du matériau après l'étape de mise en forme. On peut citer en particulier la répartition des épaisseurs dans la pièce et la minimisation du risque de rupture au cours du procédé. La prise en compte de l'anisotropie est aussi indispensable pour le calcul des propriétés mécaniques de la pièce finale. Plus récemment, la prise en compte de l'anisotropie mécanique s'est étendue à d'autres domaines d'applications tels que la biologie ou les sciences de la terre. Pour cette dernière discipline, la prise en compte de l'anisotropie mécanique est nécessaire pour la compréhension des écoulements des glaces polaire ou dans le manteau.

De plus, les données sismiques montrent que les plaques continentales sont caractérisées par de grandes zones où les orientations cristallines de l'olivine sont cohérentes [Montagner, 1994; Wustefeld *et al.*, 2008]. Ceci tend à prouver que l'anisotropie mécanique induite par les OPR d'olivine est à l'origine de processus géologiques comme la réactivation de structures héritées lors des épisodes de rifting continentaux [Vauchez *et al.*, 1997; Vauchez *et al.*, 1998; Tommasi and Vauchez, 2001], de la sismicité intraplaque [Sykes, 1978; Grana and Richardson, 1996; Attoh *et al.*, 2005; Mazabraud *et al.*, 2005] ou du magmatisme intraplaque [Tikoff *et al.*, 2008]. Afin de comprendre l'effet de l'héritage structural sur la déformation du manteau lithosphérique, une compréhension de la rhéologie de l'olivine et des méthodes de

son intégration dans un code de calcul, prenant en compte son anisotropie intrinsèque, sont nécessaires.

Ce chapitre présente donc un rappel sur la structure et le comportement mécanique de la lithosphère classiquement utilisé en sciences de la terre, sur les propriétés cristallographiques et rhéologiques de l'olivine ainsi que sur les principales approches mises au point pour l'intégration de l'anisotropie mécanique développées pour répondre au besoin de notre étude.

1 Structure et rhéologie de la lithosphère

Les informations disponibles sur la structure de la terre interne sont obtenues grâce à la sismologie. Les variations de vitesse de propagation des ondes de compression et de cisaillement, liée aux propriétés élastiques et la densité du matériau qu'elles traversent, permettent de définir la croûte dont l'épaisseur varie de 5 km à 60 km selon qu'elle soit océanique ou continental, le manteau supérieur (jusqu'à 410 km) et inférieur (670 km à 2900 km), le noyau composé d'une partie solide (2900-5150 km) et d'une graine solide au centre de la Terre. La lithosphère continentale est constituée de la croûte et de la partie superficielle du manteau supérieur. Ces deux couches sont délimitées par la discontinuité de Mohorovicic et la limite inférieure de la lithosphère est traditionnellement caractérisée par l'isotherme 1300°C.

La croûte est composée d'une partie supérieure fragile et d'une partie inférieure ductile. La croûte supérieure est généralement modélisée par un comportement plastique caractérisé par un critère d'écoulement en fracturation ou en friction.

Les critères d'écoulement en fracturation sont de type Byerlee (1970) et permettent de relier les contraintes normales et cisailantes.

Deux types de critère d'écoulement en friction sont principalement utilisés, les critères indépendants de la pression dérivés des critères classique de Tresca (1864) et de Von Mises (1913) et les critères dépendants de la pression tels que : Mohr-Coulomb, Griffith (1921), Drucker-Prager (1962), ou Murrell (1963).

La croûte inférieure et le manteau lithosphérique sont quant à eux caractérisés par un comportement viscoplastique non-linéaire en utilisant une loi de fluage de la forme (approximation 1D):

$$\dot{\epsilon} = A_0 (\sigma)^n \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \quad (2.1)$$

avec : $\dot{\epsilon}$ les taux de déformations,

A_0 une constante expérimentale,

Q l'énergie d'activation,

R la constante des gaz parfait

n le coefficient de sensibilité à la vitesse

T la température

Le calcul des propriétés mécaniques de la lithosphère continentale s'appuie généralement sur les propriétés mécaniques du quartz pour la partie crustale et de l'olivine pour la partie mantellique.

Dans le cadre de cette étude, nous nous intéresserons uniquement à la modélisation mécanique du manteau supérieur, la rhéologie de la croûte est négligée dans cette première approche.

2 Mécanismes de déformation de l'olivine

2.1 Cristallochimie de l'olivine

L'olivine est une solution solide de la famille des nésosilicates de formule $(\text{Mg,Fe})_2\text{SiO}_4$ dont les deux pôles extrêmes sont la forstérite Mg_2SiO_4 et la fayalite Fe_2SiO_4 . La structure de l'olivine a été pour la première fois décrite par [Bragg and Brown, 1926]. Les cristaux sont constitués de tétraèdres d'anions SiO_4^{4-} indépendants liés par des cations Mg^{2+} et Fe^{2+} en sites octaédriques (M1 et M2) (figure 2-1). Les liaisons Si-O sont des liaisons covalentes fortes, et les liaisons Fe-O (ou Mg-O) sont ioniques et plus faibles. Dans les conditions naturelles de température et de pression, le monocristal d'olivine présente une structure orthorhombique

(figure 2-1 et 2-2) dont les paramètres de mailles sont $a = 4.756 \text{ \AA}$, $b = 10.207 \text{ \AA}$ et $c = 5.98 \text{ \AA}$ [Smyth and Hazen, 1973].

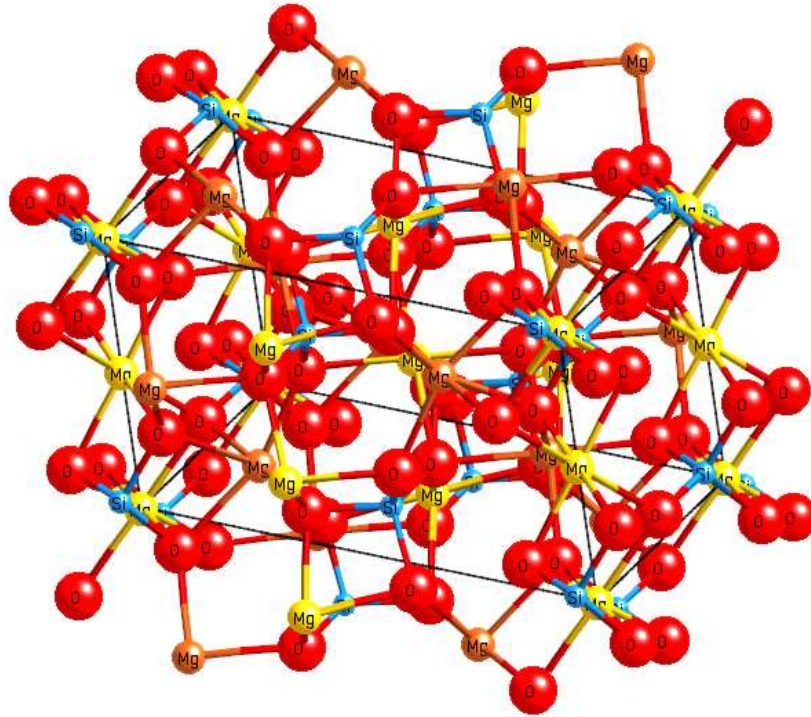


Figure 2-1 : Représentation de la structure de la forstérite

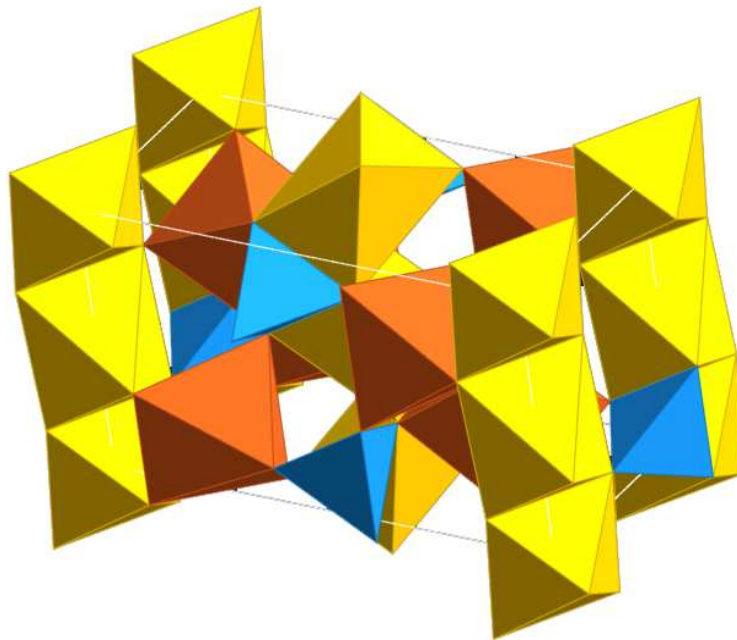


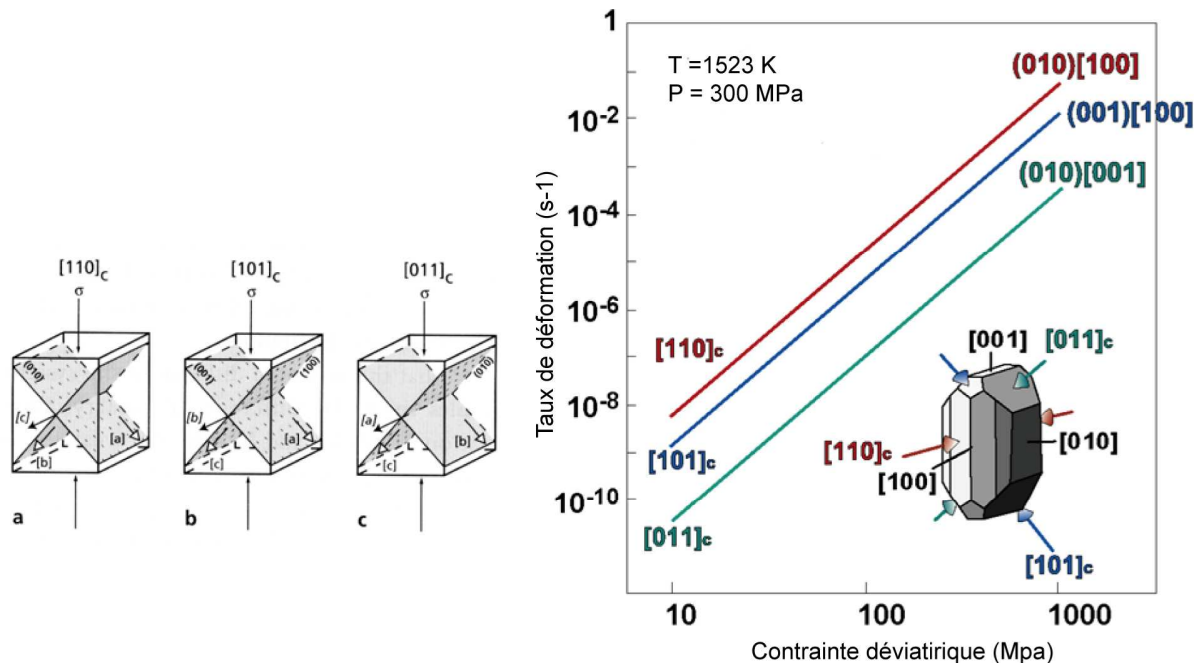
Figure 2-2 : Représentation de la maille élémentaire de la forstérite

En bleu, site tétraédrique au centre desquels se trouvent les atomes Si, en jaune et orange, les sites octaédriques (respectivement M1 et M2) aux centres desquels se trouvent les atomes Mg

2.2 Comportement mécanique du monocristal d'olivine

Dans les conditions du manteau terrestre, le monocristal d'olivine se déforme majoritairement de façon viscoplastique par glissement de dislocations. Sous l'effet d'un champ de contraintes, les dislocations se déplacent selon des systèmes de glissement définis par un plan de glissement et une direction de glissement, le vecteur de Burgers. L'activation potentielle des systèmes de glissement dépend de leur contrainte de cisaillement résolue critique (critical resolved shear stress, CRSS). Les CRSS dépendent de la cristallographie du monocristal, soit des paramètres de mailles et du type de liaisons atomiques dans les différentes directions cristallographiques.

L'olivine étant un matériau orthorhombique, c'est-à-dire de faible symétrie, elle présente une forte anisotropie mécanique, car le nombre de système de glissement potentiel est réduit et que leur CRSS varient grandement les uns par rapport aux autres. Les taux de déformations observés lors d'essais de compression de monocristal d'olivine à haute température peuvent varier de 2 ordres de grandeur selon l'orientation du cristal [Durham et al., 1974; Bai et al., 1991] (figure 2-3).



Bai et al. 1991 - JGR

Figure 2-3 : Relations contrainte-déformation obtenues par compression selon différentes directions sur monocristal d'olivine à 1523 K et 300 Mpa [Bai et al., 1991]

Il semblerait donc que les systèmes de glissement (010)[100] et (001)[100] soient plus facilement activables que les systèmes (010)[001] et que leurs CRSS soient par conséquent plus faibles.

Les CRSS ne sont toutefois pas des constantes; ils dépendent de paramètres physiques telles que la température, la pression, le champ de contrainte, la teneur en eau ou la fugacité d'oxygène. De nombreuses études expérimentales de déformation sur monocristal d'olivine, associées à des observations par microscopie optique ou électronique à transmission, ont permis de définir les systèmes de glissement potentiel et leurs CRSS pour différentes conditions physiques. Ces travaux ont montré que la déformation de l'olivine est essentiellement accommodée par les systèmes de glissement {0kl}[100] et {hk0}[001]. Les plans de glissement (010) et (001) sont les plus communément observés. Dans des conditions de haute température, de champ de contrainte faible, de pression faibles et de teneur en eau nul, les glissements dans les directions [100] sont favorisés [Raleigh, 1968; Phakey *et al.*, 1972; Goetze and Kohlstedt, 1973; Durham and Goetze, 1977; Durham *et al.*, 1977; Darot and Gueguen, 1981; Doukhan *et al.*, 1984; Mackwell *et al.*, 1985; Bai *et al.*, 1991; Bai and Kohlstedt, 1992]). Au contraire, dans des conditions de contrainte élevées, de haute pression et de haute teneur en eau, les glissements selon les directions [001] sont plus faciles. [Couvry *et al.*, 2004; Mainprice *et al.*, 2005; Jung *et al.*, 2006; Raterron *et al.*, 2007].

Les simulations de déformation de l'olivine par plasticité polycristalline utilisant des CRSS issus de données expérimentales à haute température et faible champ de contraintes [Wenk *et al.*, 1991; Tommasi *et al.*, 2000] donnent des prédictions d'évolution d'OPR en accord avec celles mesurées dans des péridotites issues de xénolites et de massifs.

De plus, les observations d'OPR d'olivine, dans le cas de basse température et de faible champ de contraintes, montrent que l'activation de systèmes de glissement selon la direction [001] est limitée dans le manteau lithosphérique à de petites zones, généralement de l'ordre du centimètre ou du mètre, ou la déformation est en grande partie accommodée par glissement aux joints de grain et par des processus de diffusion [Vissers *et al.*, 1997].

D'après ces données, nous pouvons donc considérer que la déformation de la lithosphère continentale se fait majoritairement par glissement de dislocation sur les systèmes de glissement {0kl}[100].

Dans le cadre de cette étude, les systèmes de glissement et CRSS associés les mieux adaptés sont répertoriés dans le tableau 2-1 et représenté par la figure 2-3.

Slip Systems	CRSS	Stress exponent
(010)[100]	1	3
(001)[100]	1	3
(010)[001]	2	3
(100)[001]	3	3
{011}[100]	4	3
{111}[110]	50	3
{111}[011]	50	3

Tableau 2-1: Systèmes de glissement et CRSS associés les plus adaptés dans le cadre de notre étude

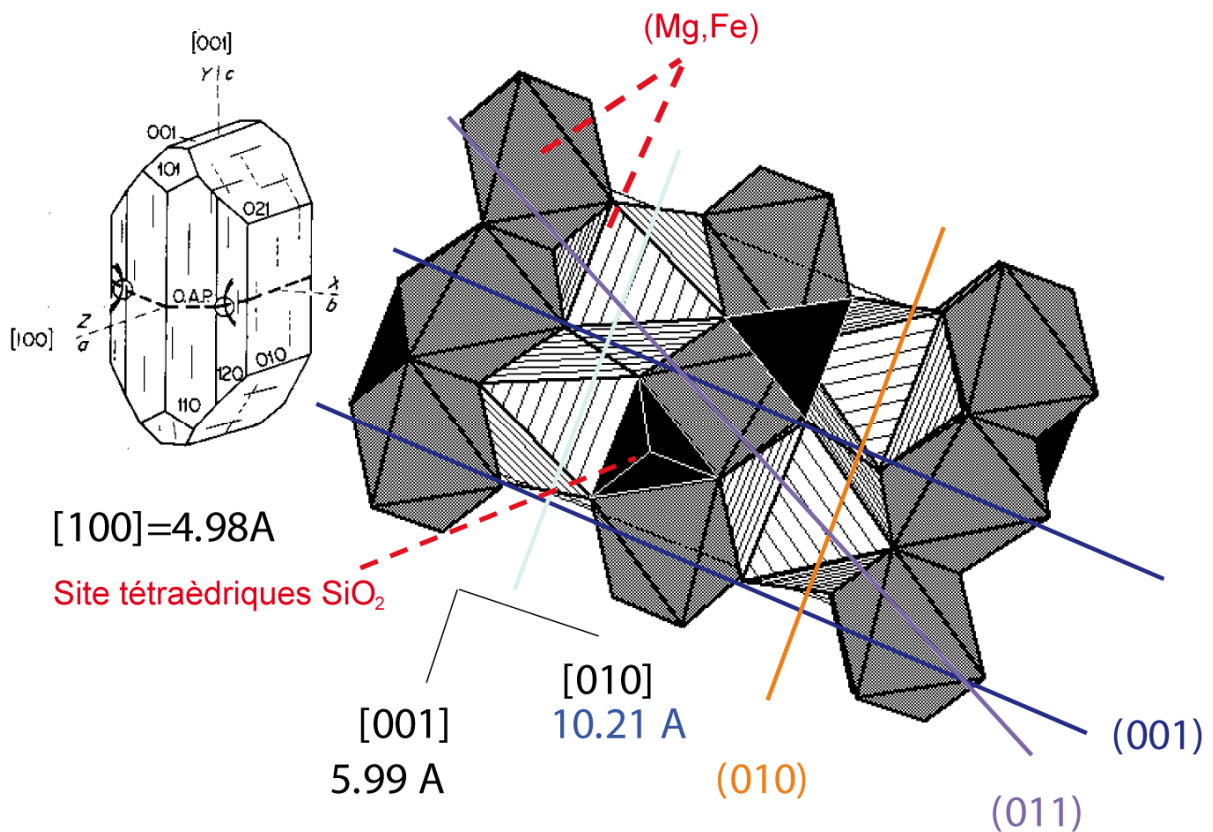


Figure 2-4: Représentation des systèmes des plans et direction de glissement dans le monocristal d'olivine

2.3 Comportement mécanique du manteau lithosphérique

L'analyse de la déformation d'échantillons mantelliques provenant d'ophiolites, de zones de subduction et de kimberlites [Ben Ismail and Mainprice, 1998], de xénolites mantelliques de Polynésie Française [Tommasi et al., 2004] ou de Sibérie [Tommasi et al., 2008] et de massifs [LeRoux et al., 2008] associée aux résultats obtenus lors d'expériences de déformation sous

différentes conditions de température et pression [Zhang and Karato, 1995; Bystricky et al., 2000; Couvy et al., 2004; Raterron et al., 2007] suggère que le manteau supérieur se déforme lui aussi essentiellement par fluage dislocation.

L'état actuel de déformation du manteau supérieur est observable grâce aux mesures d'anisotropie sismique. La caractérisation de l'anisotropie sismique dans le manteau est basée sur la mesure du déphasage des ondes SKS [Vinnik et al., 1984; Silver and Chan, 1988; Vinnik et al., 1989; Silver and Chan, 1991; Vinnik et al., 1994] ou de la variation de vitesse des ondes de surface en fonction de leur direction de propagation [Montagner, 1998]. Les ondes SKS (mais également les autres ondes de cisaillement générées à la sortie du noyau liquide comme les ondes SKKS, PKS) ont la propriété d'être polarisées dans le plan radial à l'interface noyau-manteau inférieur. Lors de la traversée d'une zone anisotrope, cette onde est séparée en deux ondes polarisées selon deux plans perpendiculaires et se propageant à des vitesses différentes. Le déphasage entre les deux ondes augmentera au fur et à mesure de leur propagation dans le milieu anisotrope.

Le monocristal d'olivine présente une importante anisotropie sismique généralement représentée par la vitesse de propagation des ondes P, le plan de polarisation des ondes Vs1 et le déphasage entre les deux ondes S (figure 2-5).

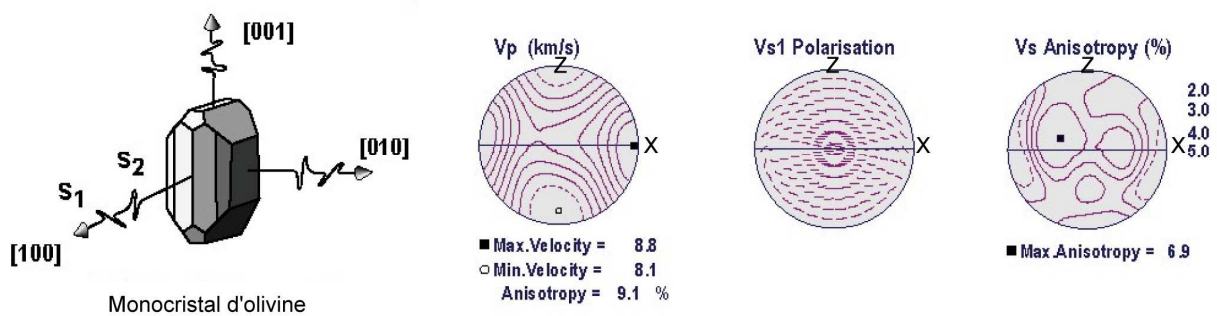


Figure 2-5: Données d'anisotropie sismique du monocristal d'olivine

La déformation élastique du monocristal d'olivine étant importante [Abramson et al., 1997], la propagation des ondes sismique dans un agrégat va être affectée par l'orientation des cristaux d'olivine (figure 2-4).

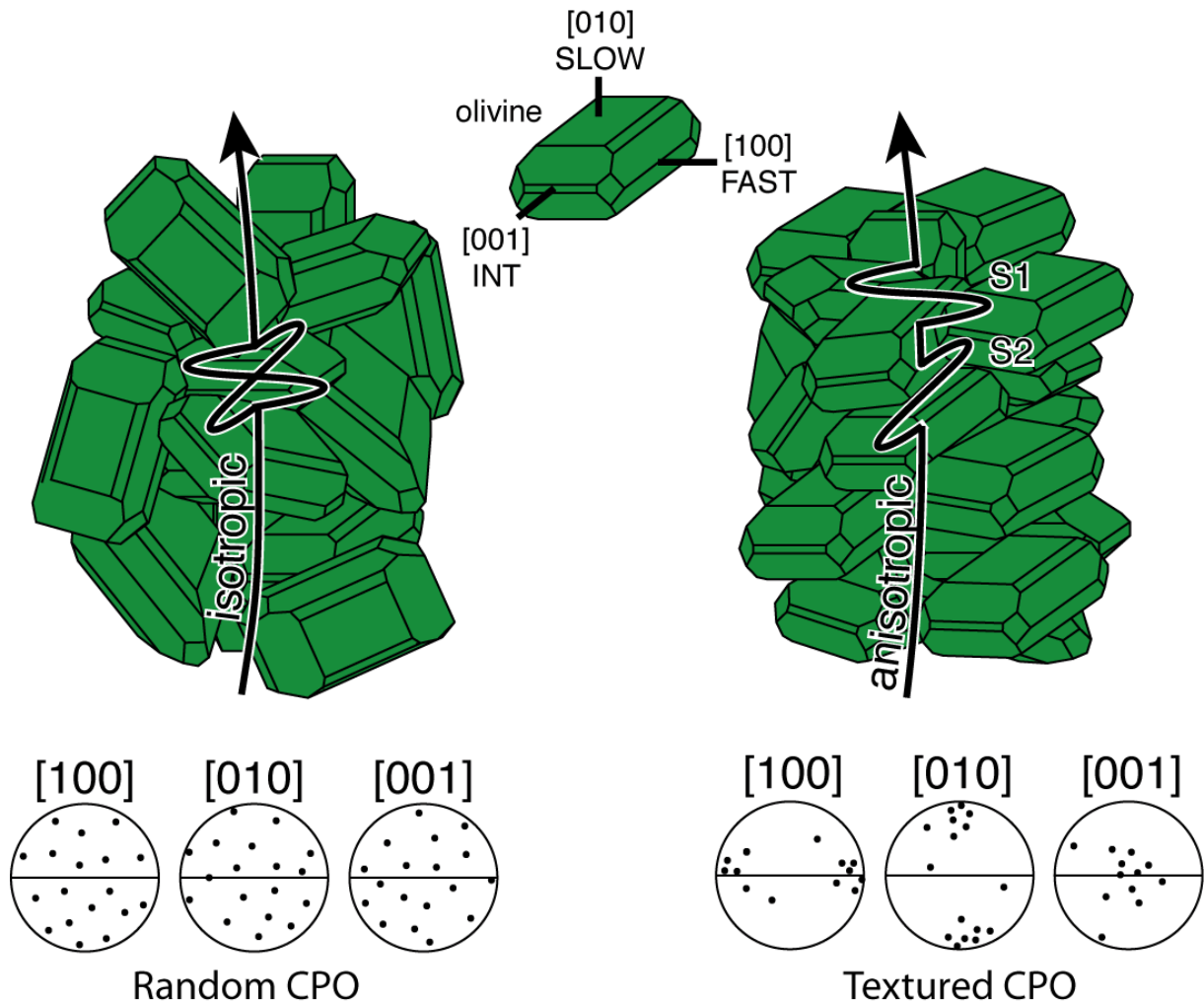


Figure 2-4: Propagation des ondes sismiques lors de la traversée d'un agrégat d'olivine. A gauche, propagation isotrope dans une zone présentant une texture aléatoire (random CPO). A droite, propagation anisotrope dans une zone présentant une texture marquée (textured CPO))

Les mesures de sismicité existantes montrent qu'il existe de grandes zones présentant une importante anisotropie sismique [Montagner, 1994; Wustefeld et al., 2008]. Cette observation implique ainsi l'existence de zones ayant des cristaux d'olivine avec des orientations uniformes. Ces OPR d'olivine présentes dans le manteau lithosphérique sous-continentale sont à l'origine du caractère anisotrope de sa rhéologie.

3 Intégration de l'anisotropie mécanique

Les études menées sur les monocristaux d'olivine et les données issues d'observations à l'échelle lithosphérique suggèrent que la rhéologie du manteau supérieur est anisotrope. Il apparaît donc nécessaire d'incorporer cette anisotropie dans la modélisation numérique des écoulements mantelliques. Cette section présente les différentes méthodes développées pour répondre à cette problématique.

3.1 Critère d'écoulement – Approche empirique

Un critère d'écoulement (ou critère de plasticité) permet de définir si, pour un tenseur de contrainte σ donné, le matériau va s'écouler plastiquement ou rester dans le domaine élastique. Il s'agit de définir mathématiquement une surface d'écoulement (ou surface de plasticité) $f(\sigma)$ qui va servir de frontière entre le domaine élastique et le domaine plastique. Cette propriété est caractérisée par :

$$\begin{cases} f(\sigma) < C & \text{représente un état élastique} \\ f(\sigma) = C & \text{représente la zone plastique où } C \text{ représente une constante du matériau} \\ f(\sigma) > C & \text{est physiquement incorrect} \end{cases} \quad (2.2)$$

Historiquement, le premier critère de plasticité isotrope a été développé par Tresca [Tresca, 1864] et stipule que le seuil de plasticité est atteint quand la contrainte atteint une valeur critique de cisaillement. Von Mises [VonMises, 1913], en partant du critère de Tresca, utilise une approche liée à l'énergie élastique de cisaillement pour définir un nouveau critère de plasticité.

La définition du premier critère de plasticité anisotrope est le fruit des travaux de Hill [Hill, 1948] qui généralise le critère de Von Mises en y introduisant des coefficients d'anisotropie :

$$f(\sigma) = \sqrt{(F(\sigma_{22} - \sigma_{33})^2 + G(\sigma_{33} - \sigma_{11})^2 + H(\sigma_{11} - \sigma_{22})^2 + 2L\sigma_{23}^2 + 2M\sigma_{13}^2 + 2N\sigma_{12}^2)} \quad (2.3)$$

où la forme de la surface de plasticité est déterminée par 6 coefficients d'anisotropie, F, G, H, L, M, N . Ces coefficients peuvent être déterminés par des essais mécaniques. Typiquement, dans le cas de tôles métalliques, on effectue des tests de traction sur des éprouvettes prélevés à 0° , 45° et 90° de la direction de laminage du matériau. Néanmoins, ce critère montre rapidement des limites pour des calculs d'emboutissage profond sur certains alliages d'aluminium et de cuivre. Ces limites proviennent de l'expression quadratique du polynôme utilisé pour la description de la surface de plasticité [Roters and Zhao, 2002]. De nouvelles expressions utilisant des polynômes d'ordre supérieur ont été depuis développées pour y palier. Hill [Hill, 1979] propose un critère d'ordre m

$$f(\sigma) = \sqrt[m]{F|\sigma_{11} - \sigma_{22}|^m + G|\sigma_{11} - \sigma_{22}|^m + H|\sigma_{11} - \sigma_{22}|^m} \quad (2.4)$$

où l'exposant m permet de contrôler la forme de la surface de plasticité. Ce critère est valable pour des matériaux orthotropes à chargement coaxial à l'orthotropie.

Pour outrepasser cette restriction, Barlat [Barlat, 1989] développe un nouveau critère anisotrope à partir des travaux de Hosford [Hosford, 1972] qui généralise le précédent aux sollicitations de contraintes planes. Ces derniers critères donnent de meilleurs résultats pour des matériaux FCC et BCC mais restent limités aux matériaux orthotropes auxquels sont imposés des sollicitations mécaniques simples. Depuis, d'autres auteurs ont apporté leur contribution au développement empirique de critère de plasticité anisotrope. Citons, entre autre, le critère développé par [Kim et al., 2007] pour des matériaux cubiques soumis à des charges complexes.

Les principaux avantages de l'utilisation d'une telle approche pour la simulation de déformation sont qu'ils sont très simples et très peu consommateurs en temps de calculs. Néanmoins, ils présentent le grand désavantage de ne pas être évolutifs, la surface de charge initiale va être le plus souvent utilisée tout au long du calcul, ou bien réactualisée mais de façon assez grossière. Ce point pose problème dans le cas d'études où la microstructure évoluant au cours du temps va entraîner un changement significatif de la surface de plasticité. On notera de plus que l'identification des paramètres du critère de plasticité peut être difficile à obtenir à partir d'essais mécaniques simples.

3.2 Critère d'écoulement – Approche cristallographique

Cette approche est similaire à la précédente. Il s'agit toujours de définir une surface de charge mais en prenant explicitement en compte certains paramètres microstructuraux en utilisant la théorie de la plasticité cristalline. Ainsi, la texture cristallographique (orientation et distribution des orientations du polycristal) ou la texture morphologique (forme des grains) peuvent être utilisées.

L'approche permettant la définition de loi de comportement dérivées de la plasticité cristalline a été utilisé par [Ning and Aifantis, 1996] pour la simulation de déformation d'acier inoxydable soumis à des charges complexes de type traction-torsion. En considérant que l'anisotropie mécanique est le résultat de la déformation à l'échelle de l'agrégat induite l'évolution de la texture, une fonction de distribution des orientations cristallines (FDO) qui va permettre de décrire de manière statistique une texture par une fonction mathématique est définie. Un tenseur de texture est ensuite calculé directement à partir de la FDO ou indirectement à partir d'équation d'évolution pour les tenseurs d'orientation et de fonctions de fermeture. [Khan and Cheng, 1996; 1998] ont développé un modèle constitutif dérivé de cette approche qui a été utilisée pour la simulation de mise en forme d'alliages de cuivre sous chargement non-proportionnel. Les prédictions d'état de contraintes-déformations obtenus sont en corrélations avec les données expérimentales existantes.

Même si ce type de méthode est physiquement plus réaliste que la méthode précédente, puisqu'elle inclut des données d'anisotropie cristalline plutôt que des fonctions empiriques, elle présente l'important désavantage de ne pas prendre en compte l'évolution de la texture au cours de la déformation. Les données microstructurales sont uniquement utilisées pour l'approximation initiale de la surface de plasticité du matériau.

Pour prendre en compte l'effet d'évolution des orientations cristallographiques, Darrieulat et al. [Darrieulat and Piot, 1996] proposent de représenter la FDO par une ensemble discret de fonction de distribution (composantes de texture) définies dans l'espace des orientations [Lucke et al., 1981; Lucke et al., 1986]. A partir de cette méthode, il est possible de décrire analytiquement la surface d'écoulement à partir du tenseur de Schmid des systèmes de glissement et de la contrainte déviatorique. Arminjon et al. [Arminjon and Bacroix, 1991; Arminjon et al., 1994] proposent une approche où la surface de plasticité, définie dans l'espace des vitesses de déformation, est reliée à la texture. Une version étendue de cette

méthode a été appliquée à des alliages d'aluminium et des aciers [*Vanhoutte et al.*, 1989; *Vanhoutte*, 1994; *Hiwatashi et al.*, 1996]. Enfin, Darrieulat et Montheillet [*Darrieulat and Montheillet*, 2003] utilisent une représentation où chaque composante de texture est associée à une équation d'écoulement quadratique. Le comportement du polycristal est ensuite décrit par une équation d'écoulement quadratique de type Hill calculé à partir des équations d'écoulements quadratiques de chaque composante de texture en utilisant deux hypothèses de moyenne. Ce modèle a servi à décrire le comportement d'agrégats de cristaux orthotropes cubiques. La méthode d'interpolation contrainte-déformation développée par Habraken et Duchene [2004] consiste à décrire uniquement une portion « utile » de la surface de charge délimitée par 5 tenseurs de contraintes relativement proches.

Ces méthodes permettent de recalculer périodiquement la surface d'écoulement plastique à différentes étapes de calcul. Cependant, l'évolution de textures au cours de la déformation doit être connue « à priori » car ces méthodes ne la prédisent pas.

3.3 Modèles polycristallins

Les premiers travaux relatifs à la plasticité cristalline remontent au second quart du XX^{ème} siècle. Ils ont été initiés par Sachs [*Sachs*, 1928] et Taylor [*Taylor*, 1938]. Deux modèles d'homogénéisation découlent de leurs travaux.

Le modèle de Sachs fait l'hypothèse de contrainte uniforme à l'échelle du grain. Ainsi, la contrainte dans chaque grain est prise égale à la contrainte appliquée à l'échelle du polycristal au cours de la déformation. Le modèle de Taylor quant à lui utilise une hypothèse de déformation plastique homogène dans chaque grain. La déformation plastique à l'échelle du grain est la même que celle appliquée au polycristal. Ces deux approches constituent respectivement une limite inférieure et une limite supérieure du comportement (estimation des contraintes) des polycristaux. Le modèle de Sachs est mieux adapté aux matériaux de faible symétrie cristallographique possédant peu de systèmes de glissement car seuls certains grains vont activer le mouvement des dislocations, ce qui implique que la compatibilité géométrique entre les différents grains n'est pas assurée. Par conséquent, ce modèle donne de bons résultats en termes de comportement mécanique, mais est moins fiable pour la prédiction de l'évolution des textures.

Le modèle de Taylor est quant à lui plus adapté aux matériaux présentant une haute symétrie cristalline car beaucoup de systèmes de glissement sont disponibles. Tous les grains vont par conséquent accommoder la même déformation et rapidement se déformer plastiquement. Néanmoins, ces deux méthodes utilisent une description du polycristal dans laquelle l'interaction entre chaque grain et le milieu qui l'entoure n'est pas prise en compte. Entre ces deux formulations, les modèles autocohérents permettent de palier ce défaut. Kröner [Kröner, 1961], en reprenant les travaux d'Eshelby [Eshelby, 1957] sur la théorie inclusionnaire, associe tous les grains de même orientation à un grain sphérique représentatif dans un milieu homogène équivalent (MHE). Ainsi, il relie l'état mécanique du grain à celui du polycristal (contexte élastique) par :

$$\sigma - \Sigma = -\beta G(\varepsilon - E) \quad (2.5)$$

où l'état mécanique du grain représentatif est donné par le tenseur des contraintes σ et le tenseur de déformation ε , l'état mécanique du polycristal est donné par le tenseur des contraintes Σ et le tenseur de déformation E , G est le module de cisaillement élastique et β une constante. Ce modèle n'est valable qu'en très faible déformation (<1%) puisqu'au-delà de ce domaine, la déformation devient plastique, le calcul en régime élastique entraîne alors une surestimation des contraintes d'accommodation. Néanmoins, ce concept servira au développement de modèles autocohérents plus évolués. Ces autres méthodes proposent d'autres modèles de comportement du grain et du MHE.

Les principales méthodes d'approximation de la solution de l'équation constitutive locale non-linéaire se divisent en trois méthodes, les formulations incrémentales où les contraintes sont reliés aux taux de déformations par le module instantané [Hill, 1965], les méthodes du premier ordre où le module local est évalué à l'aide de la moyenne par phase de la déformation locale (moment d'ordre 1) et les formulation du second ordre où le module local est calculé à partir de moment d'ordre 2 [Suquet, 1993; Castaneda, 1996; Castelnau et al., 2008a].

Parmi les méthodes du premier ordre, on distingue :

- la méthode sécante : $\sigma = m_s \dot{\epsilon}$ avec m_s le module sécant [Hutchinson, 1976],
- la méthode tangente : $\sigma = l \dot{\epsilon} + \sigma_0$ avec l le module tangent [Molinari et al., 1987; Lebensohn and Tome, 1993],
- la méthode affine : $\sigma = M_{aff} \epsilon + \sigma_0$ avec $M_{aff} = \frac{\partial^2 w}{\partial \epsilon^2}(\epsilon)$ et $\sigma_0 = \frac{\partial w}{\partial \epsilon}(\epsilon) - l(\epsilon)\epsilon$ [Masson et al., 2000; Castelnau et al., 2008b]

Les modèles élasto-plastiques prennent en compte les interactions plastiques entre l'inclusion et le milieu qui l'entoure, hypothèse négligée dans le modèle de Kröner [Kröner, 1961]. Hill [Hill, 1965] propose une formulation autocohérente incrémentale généralisée pour les petites déformations pour laquelle il suppose que le milieu infini dans lequel est plongé chaque inclusion possède un module uniforme. L'écroutissage est donc supposé uniforme autour de l'inclusion. Cette approche a été utilisée pour la simulation de déformation d'un polycristal CFC et a permis d'obtenir une beaucoup moins raide que celle obtenue à l'aide du modèle de Kröner [Hutchinson, 1970]. Lipinski et al. [1992] ont utilisé un modèle pour lequel les comportements locaux et globaux sont exprimés pour des déformations finies [Iwakuma and Nemat-Nasser, 1984] pour simuler les grandes déformations et l'évolution de texture dans le cas des polycristaux CFC et CC. Même si les réponses mécaniques obtenues par l'utilisation de lois d'interaction sont plus molles que celle du modèle élastique de Kröner, elles restent cependant plus dures que celles attendues. Molinari et al. [1997] met en cause la méthode d'approximation incrémentale qui mène à une accumulation d'erreurs dues à l'hypothèse d'un module instantané uniforme dans le milieu environnant. Des méthodes d'approximation affine, sécante et tangente ont été ensuite développées pour des comportements élasto-plastiques. La formulation affine appliquée à un polycristal CFC ayant une texture aléatoire donne une réponse plus molle [Masson et al., 2000]. Cette formulation mène à des prédictions intermédiaires entre la formulation sécante et la formulation tangente, sans recours à des paramètres calibrés a priori [Bornert et al., 2001a].

Une première extension des modèles de Hill et Kröner aux écoulements élasto-viscoplastiques a été proposée par Weng dans le cadre de petites déformations [Weng, 1982] puis étendue aux grandes déformations par Nemat-Masser et Obata [Nemat-Nasser and Obata, 1986].

Celles –ci considèrent cependant des interactions entre le grain et le milieu environnant trop fortes. L'obstacle majeur de ces approches est une mauvaise prise en compte de l'aspect visqueux de la déformation plastique. Castelnau et al. [Castelnau et al., 2008b] développe un modèle viscoélastique pour l'étude du comportement mécanique de la glace en utilisant une formulation affine.

Hutchinson [1976] propose une extension des modèle de Hill et Kröner aux comportements viscoplastiques. Une méthode d'approximation de la solution de l'équation constitutive locale non-linéaire tangente a été proposée par Molinari et al. [Molinari et al., 1987] pour les grandes déformations et généralisée pour les matériaux de symétrie hexagonale, trigonale et orthorhombique par Lebensohn and Tome [1993]. Cette approche a été utilisée par Castelnau et al. [Castelnau et al., 1996; Castelnau et al., 1997] pour l'étude du comportement de la glace et par Tommasi et al. [Tommasi et al., 1999; Tommasi et al., 2000] pour la prédiction de l'évolution mécanique et textural de l'olivine sous différents chargements et de son implication sur l'écoulement lithosphérique. Des approches vibrationnelles du second ordre ont été développées pour des comportements viscoplastiques [Castaneda, 1996], elles permettent de définir une formulation plus rigoureuse mais sont en générales plus difficile à implémenter et plus consommatrices en temps de calcul [Bornert et al., 2001b; Lebensohn et al., 2005]. Une méthode d'approximation du second-ordre a été spécialement développée et implémentée pour l'étude de la rhéologie de l'olivine [Castelnau et al., 2008a].

L'utilisation d'une méthode d'homogénéisation, de type Taylor-Bishop-Hill ou autocohérente, dans le cas d'alliages métalliques, va permettre de passer de l'état mécanique d'un grain constitutif de l'agrégat au comportement mécanique du polycristal et, ainsi, de déterminer une portion de la surface de plasticité. Cette méthode a été utilisée sur des alliages d'aluminium [Raabe, 1999; Signorelli et al., 2006], pour la simulation de mise en forme d'alliage de zinc [Delannay et al., 2004] et d'alliage de matériaux de symétrie hexagonal (magnésium ou zirconium) [Plunkett et al., 2006]. [Gagliardini and Meyssonier, 1999] puis [Gillet-Chaulet et al., 2005] utilise aussi cette méthode pour l'étude de la plasticité de la glace polaire.

3.4 Couplage modèle polycristallins et méthode EF

Une alternative à la définition de critère de plasticité permettant le calcul de déformation macroscopique est l'intégration directe d'un modèle polycristallin dans un modèle EF.

L'intégration directe de la plasticité cristalline dans une méthode EF, suggéré par [Peirce *et al.*, 1982; Asaro, 1983] et développée par [Becker, 1991; Kalidindi *et al.*, 1992; Beaudoin *et al.*, 1995; Marin and Dawson, 1998] consiste à utiliser une loi polycristalline comme loi de comportement du matériau à chaque point d'intégration du maillage EF. Cette méthode présente l'avantage de prendre en compte l'hétérogénéité du comportement mécanique cristallin, induite par son orientation cristalline, au sein du polycristal permettant ainsi de donner de meilleurs résultats en termes de prédiction d'anisotropie mécanique. De plus, la prise en compte de l'évolution de la texture au cours de la déformation est implicite. Néanmoins, ce type de méthode est très coûteux en temps de calcul. En effet, celui-ci est directement lié au nombre d'orientations cristallines définies à chaque point d'intégration du maillage EF [Bérhinger, 2006]. Cette méthode a montré de bons résultats pour l'étude de la mise en forme de plaques métalliques [Dawson *et al.*, 2003].

Différentes méthodes ont depuis été développées pour réduire le temps de calcul prohibitif de ce type de couplage en limitant le nombre d'orientations nécessaires au calcul. [Zhao *et al.*, 2001] et [Raabe *et al.*, 2002] proposent une méthode de composante de texture qui consiste à définir mathématiquement un petit ensemble d'orientations par une Gaussienne permettant de représenter l'ensemble de la texture. Bérhinger *et al.* [Beringhier *et al.*, 2007; Loge *et al.*, 2007] développe une méthode de distribution de la texture initiale autour de particules Lagrangiennes, revenant à distribuer la texture sur plusieurs éléments voisins, et permettant de réduire considérablement le temps de calcul dans le cadre d'une loi polycristalline élasto-viscoplastique appliqué à des matériaux de haute symétrie. [Kalidindi *et al.*, 2004; Kalidindi and Duvvuru, 2005] présentent une méthode dite de « Microstructure Sensitive Design » qui consiste à discrétiser les orientations cristallographiques sous la forme d'un développement en série de Fourier de la texture initiale [Bunge, 1993]. Les coefficients issus de la décomposition en série de Fourier de la FDO permettent de représenter la texture comme un point dans l'espace de Fourier de dimension infini.

Pour chaque grain constitutif, les coefficients de Fourier correspondant à leur orientation sont calculés et les contraintes monocristallines résultantes de la déformation macroscopique

imposée sur le polycristal sont calculées dans l'espace de Fourier par des techniques de régression linéaire. La contrainte polycristalline est ensuite déduite en utilisant une hypothèse de Taylor. Enfin, Kalidindi et al. [2005] calcule l'évolution des textures en utilisant une loi de transformation linéaire donnant l'évolution des coefficients de Fourier pour un incrément donné [Bunge and Esling, 1984].

Ce type d'approche a été utilisé pour des matériaux FCC [Duvvuru et al., 2006; Houskamp et al., 2006] et plus récemment hexagonaux compacts [Fast et al., 2008].

3.5 Méthode EF²

La dernière méthode utilisée pour comprendre le comportement mécanique d'un polycristal consiste à mailler individuellement chaque grain constitutif. Cette approche est qualifiée de modèle EF « microstructural ». L'approche EF² consiste à mailler le solide en déformation à l'échelle macroscopique de manière classique par une méthode EF. A chaque point d'intégration du maillage de ce solide macroscopique, un polycristal est défini par une méthode EF « microstructurale ». Ce modèle est donc composé de deux maillages imbriqués, d'où le nom de méthode EF² [Smith et al., 1999]. Cette mise en données du problème amène donc à la résolution d'un problème élément fini dont les conditions aux limites évoluent de façons non-linéaire ce qui entraîne des temps de calculs bien supérieurs aux méthodes précédemment présentées. Cette méthode a été utilisée par Nakamachi et al. [Nakamachi et al., 2005] pour la détermination de courbe limite de formage lors de simulation 3D de mise en forme de plaques métalliques.

4 Conclusion

De nombreuses études ont été menées pour développer des solutions variées au problème de l'intégration de l'anisotropie lors de modélisation numérique de la déformation d'un volume solide. Dans le cadre de notre étude, la solution la mieux adaptée est le couplage de modèles polycristallins à une méthode EF.

En effet :

- La méthode EF^2 s'appuie sur des fondements physiques solides et rigoureux. Cependant, les temps de calculs engendrés sont trop importants pour permettre de l'utiliser avec des maillages 3D macroscopiques de plusieurs centaines / milliers d'éléments.
- L'approche d'intégration d'anisotropie basée sur la description empirique ou cristallographique du critère d'écoulement est aisée à implanter dans un code EF. Néanmoins, ces modèles ne prennent pas en compte l'évolution des orientations cristallines au cours de la déformation et, par conséquent, l'évolution de l'anisotropie mécanique macroscopique. De plus, les critères d'écoulement sont difficiles à déterminer pour des matériaux de faible symétrie. Les modèles intégrant l'effet de la texture permettent de palier à ce défaut mais les temps de calcul engendrés par le recalcul de la surface charge, ou d'une portion de surface de charge, réduisent l'intérêt de ce type de modèle.

Pour la suite de l'étude, compte tenu de la faible symétrie cristalline et des données rhéologiques expérimentales du monocristal de l'olivine, la stratégie retenue est l'intégration d'un modèle viscoplastique autocohérent couplé comme loi de comportement du matériau à un code EF. Les données expérimentales existantes montrent que les approches tangentes et borne inférieure (modèle de Sachs) donnent une meilleure prédiction du comportement mécanique d'un polycristal que les approches sécantes, affines ou du second ordre. Cette observation vient du fait que l'écoulement du manteau se fait uniquement à haute température et que, par conséquent, des mécanismes diffusifs accommodent une partie non négligeable de la déformation, relaxant ainsi la condition de compatibilité de la déformation. Le modèle de Sachs étant moins fiable que l'approche tangente pour la prédiction de l'évolution de texture, cette dernière a donc été retenue. Finalement, la stratégie de distribution des orientations cristallographiques par particule Lagrangienne est utilisée pour gérer le transport des variables au cas où des étapes de remaillage sont nécessaires.

Références bibliographiques

- Abramson, E. H., et al. (1997), The elastic constants of San Carlos olivine to 17 GPa, *Journal of Geophysical Research-Solid Earth*, 102(B6), 12253-12263.
- Arminjon, M., and B. Bacroix (1991), On plastic potentials for anisotropic metals and their derivation from the texture function, *Acta Mech.*, 88(3-4), 219-243.
- Arminjon, M., et al. (1994), A 4th-order plastic potential for anisotropic metals and its analytical calculation from the texture function, *Acta Mech.*, 107(1-4), 33-51.
- Asaro, R. J. (1983), Micromechanics of crystals and polycrystals, *Advances in Applied Mechanics*, 23, 1-115.
- Attoh, K., et al. (2005), The role of Pan-African structures in intraplate seismicity near the termination of the Romanche Fracture Zone, West Africa, *Journal of African Earth Sciences*, 43(5), 549-555.
- Bai, Q., et al. (1991), High-temperature creep of olivine .1. Mechanical results for buffered samples, *Journal of Geophysical Research-Solid Earth and Planets*, 96(B2), 2441-2463.
- Bai, Q., and D. L. Kohlstedt (1992), High-temperature creep of olivine single-crystals .2. Dislocation-structures, *Tectonophysics*, 206(1-2), 1-29.
- Barlat, F. (1989), Plastic behaviour and stretchability of sheet materials. Part I: A yield function for orthotropic sheet under plane stress conditions, *International Journal of Plasticity*, 5, 51-66.
- Beaudoin, A. J., et al. (1995), A Hybrid finite-element formulation for polycrystal plasticity with consideration of macrostructural and microstructural linking, *International Journal of Plasticity*, 11(5), 501-521.
- Becker, R. (1991), Analysis of texture evolution in channel die compression .1. Effects of grain interaction, *Acta Metallurgica Et Materialia*, 39(6), 1211-1230.
- Ben Ismail, W., and D. Mainprice (1998), An olivine fabric database: an overview of upper mantle fabrics and seismic anisotropy, *Tectonophysics*, 296(1-2), 145-157.
- Bérhingier, M. (2006), Distribution et transport des variables de modèles polycristallins pour la prédiction de l'anisotropie mécanique des métaux en mise en forme, *Thèse de doctorat, Ecole Nationale supérieure des Mines de Paris, Sophia Antipolis*.
- Beringhier, M., et al. (2007), Using Lagrangian particles to efficiently describe microstructure evolution in metal forming - application to texture-induced mechanical anisotropy, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 15(3), 191-204.

- Bornert, M., et al. (2001a), Homogénéisation en mécanique des matériaux. 1. Matériaux aléatoires élastiques et milieux périodiques, *Paris, Hermes Sciences publications*.
- Bornert, M., et al. (2001b), Second-order estimates for the effective behaviour of viscoplastic polycrystalline materials, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 49(11), 2737-2764.
- Bragg, W. L., and G. B. Brown (1926), Die struktur des Olivins, *Zeit. Krist.*, 63, 538.
- Bunge, H. J., and Esling (1984), Texture development by plastic deformation, *Scripta Materialia*, 18, 191-196.
- Bunge, H. J. (1993), In: Texture analysis in Materials Science, *Mathematical Methods. Curvillier, Verlag, Göttingen*.
- Bystricky, M., et al. (2000), High shear strain of olivine aggregates: Rheological and seismic consequences, *Science*, 290(5496), 1564-1567.
- Castaneda, P. P. (1996), Exact second-order estimates for the effective mechanical properties of nonlinear composite materials, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 44(6), 827-862.
- Castelnau, O., et al. (1996), Viscoplastic modeling of texture development in polycrystalline ice with a self-consistent approach: Comparison with bound estimates, *Journal of Geophysical Research-Solid Earth*, 101(B6), 13851-13868.
- Castelnau, O., et al. (1997), Modelling viscoplastic behavior of anisotropic polycrystalline ice with a self-consistent approach, *Acta Mater.*, 45, 4823-4834.
- Castelnau, O., et al. (2008a), Micromechanical modeling of the viscoplastic behavior of olivine, *Journal of Geophysical Research-Solid Earth*, 113(B9), 18.
- Castelnau, O., et al. (2008b), Elastoviscoplastic micromechanical modeling of the transient creep of ice, *JOURNAL OF GEOPHYSICAL RESEARCH*, 113.
- Couvy, H., et al. (2004), Shear deformation experiments of forsterite at 11GPa-1400 degrees C in the multianvil apparatus, *European Journal of Mineralogy*, 16(6), 877-889.
- Darot, M., and Y. Gueguen (1981), High-temperature creep of forsterite single-crystals, *Journal of Geophysical Research*, 86(NB7), 6219-6234.
- Darrieulat, M., and D. Piot (1996), A method of generating analytical yield surfaces of crystalline materials, *International Journal of Plasticity*, 12(5), 575-610.
- Darrieulat, M., and F. Montheillet (2003), A texture based continuum approach for predicting the plastic behaviour of rolled sheet, *International Journal of Plasticity*, 19(4), 517-546.
- Dawson, P. R., et al. (2003), Advances in sheet metal forming analyses: dealing with mechanical anisotropy from crystallographic texture, *International Materials Reviews*, 48(2), 86-122.

- Delannay, L., et al. (2004), Prediction of the planar anisotropy of springback after bending of a textured zinc sheet, paper presented at 8th International Conference on Numerical Methods in Industrial Forming Processes, Amer Inst Physics, Columbus, OH, Jun 13-17.
- Doukhan, N., et al. (1984), A TEM microstructural study of experimentally deformed Anita Bay dunite, in *Deformation of Ceramics II*, edited by R.E. Trexler and R.C. Bradt, New York, 307-319.
- Durham, W. B., et al. (1974), Plastic flow of single-crystal olivine, *Transactions-American Geophysical Union*, 55(12), 1194-1194.
- Durham, W. B., and C. Goetze (1977), Plastic flow of oriented single-crystals of olivine .1. Mechanical data, *Journal of Geophysical Research*, 82(36), 5737-5753.
- Durham, W. B., et al. (1977), Plastic flow of oriented single-crystals of olivine .2. Observations and interpretations on dislocation-structures, *Journal of Geophysical Research*, 82(36), 5755-5770.
- Duvvuru, H. K., et al. (2006), Application of microstructure sensitive design to FCC polycrystals, paper presented at Beijing International Materials Week, Trans Tech Publications Ltd, Beijing, PEOPLES R CHINA, Jun 25-30.
- Eshelby, J. (1957), The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems., *Proceedings of the Royal Society of London Series a-Mathematical and Physical Sciences*, A241, 376-396.
- Fast, T., et al. (2008), Application of microstructure sensitive design to structural components produced from hexagonal polycrystalline metals, *Comput. Mater. Sci.*, 43(2), 374-383.
- Gagliardini, O., and J. Meyssonier (1999), Analytical derivations for the behavior and fabric evolution of a linear orthotropic ice polycrystal, *Journal of Geophysical Research-Solid Earth*, 104(B8), 17797-17809.
- Gillet-Chaulet, F., et al. (2005), A user-friendly anisotropic flow law for ice-sheet modelling, *J. Glaciol.*, 51(172), 3-14.
- Goetze, C., and D. L. Kohlstedt (1973), Laboratory study of dislocation climb and diffusion in olivine, *Journal of Geophysical Research*, 78(26), 5961-5971.
- Grana, J. P., and R. M. Richardson (1996), Tectonic stress within the New Madrid seismic zone, *Journal of Geophysical Research-Solid Earth*, 101(B3), 5445-5458.
- Habraken, A. M., and L. Duchene (2004), Anisotropic elasto-plastic finite element analysis using a stress-strain interpolation method based on a polycrystalline model, *International Journal of Plasticity*, 20(8-9), 1525-1560.

- Hill, R. (1948), A theory of the yielding and plastic flow of anisotropic metals, *Proceedings of the Royal Society of London Series a-Mathematical and Physical Sciences*, 193(1033), 281-297.
- Hill, R. (1965), Continuum Micro-Mechanics of elastoplastic polycrystals, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 13(2), 89-&.
- Hill, R. (1979), Theoretical plasticity of textured aggregates, *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 85(JAN), 179-191.
- Hiwatashi, S., et al. (1996), Modelling of plastic anisotropy based on texture and dislocation structure, paper presented at 6th International Workshop on Computational Mechanics of Materials, Elsevier Science Bv, Hamburg, Germany, Oct 07-08.
- Hosford, W. F. (1972), A generalized yield criterion, *J. Appl. Mech. trans. , ASME* 39, 607-609.
- Houskamp, J. R., et al. (2006), Integration of microstructure-sensitive design with finite element methods: Elastic-plastic case studies in FCC polycrystals, paper presented at 43rd Annual Technical Meeting of the Society-of-Engineering-Sciences, Begell House Inc, State Coll, PA, Aug 13-16.
- Hutchinson, J. W. (1970), Elastic-plastic behaviour of polycrystalline metals and composites, *Proceedings of the Royal Society of London Series a-Mathematical and Physical Sciences*, 319(1537), 247-&.
- Hutchinson, J. W. (1976), Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline materials, *Proceedings of the Royal Society of London Series a-Mathematical and Physical Sciences*, A348, 101.
- Iwakuma, T., and S. Nemat-Nasser (1984), Finite elastic-plastic deformation of polycrystalline metals, *Proc. Roy. Soc. London, A* 394, 87-119.
- Jung, H., et al. (2006), Effect of water and stress on the lattice-preferred orientation of olivine, *Tectonophysics*, 421(1-2), 1-22.
- Kalidindi, S. R., et al. (1992), Crystallographic texture evolution in bulk deformation processing of FCC materials, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 40(3), 537-569.
- Kalidindi, S. R., et al. (2004), Microstructure sensitive design of an orthotropic plate subjected to tensile load, *International Journal of Plasticity*, 20(8-9), 1561-1575.
- Kalidindi, S. R., and H. K. Duvvuru (2005), Spectral methods for capturing crystallographic texture evolution during large plastic strains in metals, *Acta Mater.*, 53(13), 3613-3623.

- Kalidindi, S. R., et al. (2005), Microstructure sensitive design with first order homogenization theories and finite element codes, paper presented at 14th International Conference on Textures of Materials, Trans Tech Publications Ltd, Leuven, BELGIUM, Jul 11-15.
- Khan, A. S., and P. Cheng (1996), An anisotropic elastic-plastic constitutive model for single and polycrystalline metals. I-theoretical developments *international Journal of Plasticity*, 12, 147-162.
- Khan, A. S., and P. Cheng (1998), An anisotropic elastic-plastic constitutive model for single and polycrystalline metals. II—Experiments and predictions concerning thin-walled tubular OFHC copper, *international Journal of Plasticity*, 14, 209-226.
- Kim, D., et al. (2007), Non-quadratic anisotropic potentials based on linear transformation of plastic strain rate, *International Journal of Plasticity*, 23(8), 1380-1399.
- Kröner, E. (1961), Zur Plastischen Verformung des Vielkristalls, *Acta. Metall. Mater.*, 9, 155-161.
- Lebensohn, R. A., and C. N. Tome (1993), A self-consistent anisotropic approach for the simulation of plastic-deformation and texture development of polycrystals - Application to zirconium alloys, *Acta Metallurgica Et Materialia*, 41(9), 2611-2624.
- Lebensohn, R. A., et al. (2005), Improving the self-consistent predictions of texture development of polycrystals incorporating intragranular field fluctuations, paper presented at 14th International Conference on Textures of Materials, Trans Tech Publications Ltd, Leuven, BELGIUM, Jul 11-15.
- LeRoux, V., et al. (2008), Feedback between melt percolation and deformation in an exhumed lithosphere-asthenosphere boundary., *Earth and Planetary Science Letters*, *In press*.
- Lipinski, P., et al. (1992), Recent results concerning the modeling of polycrystalline plasticity at large strains, *Int. J. Solids Struct.*, 29(14-15), 1873-1881.
- Loge, R. E., et al. (2007), Reducing computational cost and allowing automatic remeshing in FEM models of metal forming coupled with polycrystal plasticity, paper presented at 9th International Conference on Numerical Methods in Industrial Forming Processes (NUMIFORM 07), Amer Inst Physics, Oporto, PORTUGAL, Jun 17-21.
- Lucke, K., et al. (1981), On the problem of the reproduction of the true orientation distribution from pole figures, *Acta Metallurgica*, 29(1), 167-185.
- Lucke, K., et al. (1986), On the presentation of orientation distribution-function by model functions, *Z. Metallk.*, 77(5), 312-321.
- Mackwell, S. J., et al. (1985), The role of water in the deformation of olivine single-crystals, *Journal of Geophysical Research-Solid Earth and Planets*, 90(NB13), 1319-1333.

- Mainprice, D., et al. (2005), Pressure sensitivity of olivine slip systems and seismic anisotropy of Earth's upper mantle, *Nature*, 433(7027), 731-733.
- Marin, E. B., and P. R. Dawson (1998), On modeling the elastic-plastic response of polycrystalline materials, *Comp. Methods. Appl. Mech. Engrg.*, 132, 1-21.
- Masson, R., et al. (2000), An affine formulation for the prediction of the effective properties of nonlinear composites and polycrystals, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 48(6-7), 1203-1227.
- Mazabraud, Y., et al. (2005), Characterisation of the seismological pattern in a slowly deforming intraplate region: Central and western France, *Tectonophysics*, 409(1-4), 175-192.
- Molinari, A., et al. (1987), A self-consistent approach of the large deformation polycrystal viscoplasticity, *Acta Metallurgica*, 35(12), 2983-2994.
- Molinari, A., et al. (1997), On the self-consistent modeling of elastic-plastic behavior of polycrystals, *Mech. Mater.*, 26(1), 43-62.
- Montagner, J. P. (1994), Can seismology tell us anything about convection in the mantle, *Reviews of Geophysics*, 32(2), 115-137.
- Montagner, J. P. (1998), Where can seismic anisotropy be detected in the earth's mantle? In boundary layers, *Pure and Applied Geophysics*, 151(2-4), 223-256.
- Nakamachi, E., et al. (2005), Multi-scale finite element analyses of sheet metals by using SEM-EBSD measured crystallographic RVE models, paper presented at Conference on Advances in Metal Forming - Experiments Constitutive Models and Simulations, Pergamon-Elsevier Science Ltd, Detroit, MI, Aug 15-19.
- Nemat-Nasser, S., and M. Obata (1986), Finite elasto-plastic deformation of polycrystals, *Proc. Roy. Soc. London, A* 407, 343-375.
- Ning, J., and E. C. Aifantis (1996), Anisotropic yield and plastic flow of polycrystalline solids, *International Journal of Plasticity*, 12(10), 1221-1240.
- Peirce, D., et al. (1982), An analysis of nonuniform and localized deformation in ductile single-crystals, *Acta Metallurgica*, 30(6), 1087-1119.
- Phakey, P., et al. (1972), Transmission electron microscopy of experimentally deformed olivine crystals, in *Flow and fracture of rocks*, *Geophys. Monogr. Ser.*, edited by H.C. Heard et al., AGU, Washington, D.C., 16, 117-138.
- Plunkett, B., et al. (2006), Anisotropic yield function of hexagonal materials taking into account texture development and anisotropic hardening, *Acta Mater.*, 54(16), 4159-4169.

- Raabe, D. (1999), Yield surface simulation for partially recrystallized aluminium polycrystals on the basis of spatially discrete data, paper presented at 9th International Workshop on Computational Mechanics of Materials, Elsevier Science Bv, Berlin, Germany, Oct 04-05.
- Raabe, D., et al. (2002), Concepts for integrating plastic anisotropy into metal forming simulations, *Adv. Eng. Mater.*, 4(4), 169-180.
- Raleigh, C. B. (1968), Mechanisms of plastic deformation of olivine, *Journal of Geophysical Research*, 73(16), 5391-&.
- Raterron, P., et al. (2007), Pressure-induced slip-system transition in forsterite: Single-crystal rheological properties at mantle pressure and temperature, *Am. Miner.*, 92(8-9), 1436-1445.
- Roters, F., and Z. Zhao (2002), Application of the Texture Component Crystal Plasticity Finite Element Method for Deep Drawing Simulations - A Comparison with Hill's Yield Criterion, *Adv. Eng. Mater.*, 4, 221-223.
- Sachs, G. (1928), Zur Ableitung einer Fließbedingung, *Z. Ver. Deut. Ing.*, 72(8), 734-736.
- Signorelli, J. W., et al. (2006), Computational modeling of texture and microstructure evolution in Al alloys deformed by ECAE, *Scripta Materialia*, 55(12), 1099-1102.
- Silver, P. G., and W. W. Chan (1988), Implications for continental structure and evolution from seismic anisotropy, *Nature*, 335(6185), 34-39.
- Silver, P. G., and W. W. Chan (1991), Shear-wave splitting and subcontinental mantle deformation, *Journal of Geophysical Research-Solid Earth*, 96(B10), 16429-16454.
- Smith, R. J. M., et al. (1999), Prediction of the mechanical behavior of non linear heterogeneous systems by multi-level finite element modeling, *Comp. Methods. Appl. Mech. Engrg.*, 155, 181-192.
- Smyth, J. R., and R. M. Hazen (1973), The crystal structures of forsterite and hortonolite at several temperatures up to 900°C, *Am. Mineral*, 58, 588-593.
- Suquet, P. M. (1993), Overall potentials and extremal surfaces of power-law or ideally plastic composites, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 41(6), 981-1002.
- Sykes, L. R. (1978), Intraplate seismicity, reactivation of preexisting zones of weakness, alkaline magmatism, and other tectonism postdating continental fragmentation, *Reviews of Geophysics*, 16(4), 621-688.
- Taylor, G. I. (1938), Plastic strain in metals, *J. Inst. Metals*, 62, 307-324.
- Tikoff, B., et al. (2008), Lithospheric control on the initiation of the Yellowstone hotspot: Chronic reactivation of lithospheric scars, *International Geology Review*, 50(3), 305-324.

- Tommasi, A., et al. (1999), Upper mantle tectonics: three-dimensional deformation, olivine crystallographic fabrics and seismic properties, *Earth and Planetary Science Letters*, 168(1-2), 173-186.
- Tommasi, A., et al. (2000), Viscoplastic self-consistent and equilibrium-based modeling of olivine lattice preferred orientations: Implications for the upper mantle seismic anisotropy, *Journal of Geophysical Research-Solid Earth*, 105(B4), 7893-7908.
- Tommasi, A., and A. Vauchez (2001), Continental rifting parallel to ancient collisional belts: an effect of the mechanical anisotropy of the lithospheric mantle, *Earth and Planetary Science Letters*, 185(1-2), 199-210.
- Tommasi, A., et al. (2004), Seismic anisotropy and compositionally induced velocity anomalies in the lithosphere above mantle plumes: a petrological and microstructural study of mantle xenoliths from French Polynesia, *Earth and Planetary Science Letters*, 227(3-4), 539-556.
- Tommasi, A., et al. (2008), Deformation, static recrystallization, and reactive melt transport in shallow subcontinental mantle xenoliths (Tok Cenozoic volcanic field, SE Siberia), *Earth and Planetary Science Letters*, 272(1-2), 65-77.
- Tresca, H. (1864), Mémoire sur les corps soumis à de fortes pressions, *Comptes rendus Acad. Sci. Paris*, 59, 754-758.
- Vanhoutte, P., et al. (1989), APPLICATION OF YIELD LOCI CALCULATED FROM TEXTURE DATA, *Textures Microstruct.*, 11(1), 23-39.
- Vanhoutte, P. (1994), APPLICATION OF PLASTIC POTENTIALS TO STRAIN-RATE SENSITIVE AND INSENSITIVE ANISOTROPIC MATERIALS, *International Journal of Plasticity*, 10(7), 719-748.
- Vauchez, A., et al. (1997), Why do continents break-up parallel to ancient orogenic belts?, *Terra Nova*, 9(2), 62-66.
- Vauchez, A., et al. (1998), Rheological heterogeneity, mechanical anisotropy and deformation of the continental lithosphere, *Tectonophysics*, 296(1-2), 61-86.
- Vinnik, L., et al. (1994), Anisotropy in the center of the Inner-Core, *Geophysical Research Letters*, 21(16), 1671-1674.
- Vinnik, L. P., et al. (1984), Lithosphere anisotropy from the observation of SKS and SKKS waves, *Doklady Akademii Nauk Sssr*, 278(6), 1335-1339.
- Vinnik, L. P., et al. (1989), Azimuthal anisotropy in the earth from observations of SKS at geoscope and nars broad-band stations, *Bull. Seismol. Soc. Amer.*, 79(5), 1542-1558.

- Visser, R. L. M., et al. (1997), Mylonitic deformation in upper mantle peridotites of the North Pyrenean Zone (France): implications for strength and strain localization in the lithosphere, *Tectonophysics*, 279(1-4), 303-325.
- VonMises, R. (1913), Mechanik der festen Körper in plastisch-deformablen Zustand, Nachr Konigl Ges Wiss Gottingen, *Math Phys*, 582-592.
- Weng, G. J. (1982), A unified, self-consistent theory for the plastic-creep deformation of metals, *J. Appl. Mech.-Trans. ASME*, 49(4), 728-734.
- Wenk, H. R., et al. (1991), Modeling plastic-deformation of peridotite with self-consistent theory, *Journal of Geophysical Research-Solid Earth and Planets*, 96(B5), 8337-8349.
- Wustefeld, A., et al. (2008), SplitLab: A shear-wave splitting environment in Matlab, *Comput. Geosci.*, 34(5), 515-528.
- Zhang, S. Q., and S. Karato (1995), Lattice preferred orientation of olivine aggregates deformed in simple shear, *Nature*, 375(6534), 774-777.
- Zhao, Z., et al. (2001), Introduction of a texture component crystal plasticity finite element method for anisotropy simulations, *Adv. Eng. Mater.*, 3(12), 984-990.

Chapitre 3 :

Méthode de couplage FEM/ Modèle polycristallin

Sommaire	40
1 Présentation de Forge2005®	41
1.1 Formulation du problème mécanique	41
1.2 Discrétisation du problème	44
1.2.1 Discrétisation spatiale	44
1.2.2 Discrétisation temporelle.....	47
1.3 Résolution du système	48
2 Présentation du modèle VPSC	51
2.1 Equation mécanique monocristalline et polycristalline.....	51
2.2 Résolution du modèle VPSC	56
2.3 Remaillage	57
3 Stratégie de couplage EF/VPSC.....	58
3.1 Présentation	58
3.2 Avantage et inconvénients des couplages fort et faible.....	59
4 Couplage faible, couplage fort et modèle « découplé »	61
4.1 Validation des méthodes de couplage	61
4.2 Choix de la méthode de couplage.....	65
4.3 Validation du remaillage	68
5 Conclusion.....	70
Références bibliographiques	72

Ce chapitre présente la méthode de couplage entre le modèle éléments finis et la loi polycristalline ainsi que sa validation numérique. Dans la première partie, nous rappellerons la formulation et la méthode de résolution mécanique du modèle éléments finis FORGE2005[®] en 3 dimensions (FORGE3[®]). Nous présenterons dans la seconde partie la loi rhéologique polycristalline utilisée, le modèle viscoplastique auto-cohérent (VPSC) [*Lebensohn and Tome, 1993*] ainsi que la stratégie de transport des variables microstructurales basées sur le concept de particules lagrangiennes utilisée au cours du remaillage. Ensuite, la troisième partie portera sur les stratégies de couplage envisagées pour la résolution de notre problème. Finalement, la quatrième et dernière partie détaillera la validation du couplage numérique FORGE2005[®]/VPSC.

1 Présentation de Forge2005[®]

Le logiciel commercial FORGE2005[®] est initialement dédié à la simulation du forgeage des alliages métalliques ferreux et non-ferreux de pièces 2D et 3D. Il est développé depuis de nombreuses années au centre de mise en forme des matériaux (CEMEF) de l'école des Mines de Paris à Sophia-Antipolis.

Sur les versions antérieures du code EF, l'influence des conditions mécaniques sur les microstructures avaient été étudiés pour des alliages d'aluminium [*Noat, 1996*] et de Zirconium [*Logé, 1999*].

Une première implémentation de loi polycristalline dans FORGE2005[®] a été effectuée par [*Bérhinger, 2006*] pour une loi de élasto-viscoplastique de type Taylor pour permettre de prédire l'anisotropie induite par la microstructure lors de la mise en forme de structures brut de solidification (acier) ou de structures forgées (aciers corroyés ou alliage d'aluminium).

1.1 Formulation du problème mécanique

Le logiciel FORGE3[®] est basé sur une formulation faible mixte en vitesse et pression. Les effets thermiques seront négligés dans cette étude. Le milieu à déformer est assimilé à un domaine fini Ω de frontière $\partial\Omega$. Son comportement est régi par les équations fondamentales de conservation de la masse et de la quantité de mouvement :

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho v) = 0 \\ \text{div}(\sigma) + \rho f = \rho \frac{\partial v}{\partial t} \end{cases} \quad (3.1)$$

où ρ désigne la masse volumique, t le temps, v le champ de vitesse, σ le champ de contrainte et f la densité des forces volumiques.

On considère d'une part que la dérivé par rapport au temps de la masse volumique s'annule (hypothèse de stationnarité). D'autre part, si on ajoute à ces hypothèses que les forces volumiques et d'inerties sont négligeables au cours de la déformation, le système (3.1) peut s'écrire :

$$\begin{cases} \text{div}(v) = \text{tr}(\dot{\epsilon}) + \frac{\dot{p}}{\chi} = 0 \\ \text{div}(\sigma) = 0 \end{cases} \quad (3.2)$$

Où \dot{p} est la dérivée temporelle de la pression et χ le coefficient de compressibilité du matériau

En décomposant le champ de contrainte en sa partie déviatorique s et sphérique $\frac{1}{3}\text{tr}(\sigma)I = -pI$, où I est la matrice identité et p la pression hydrostatique, on obtient le système :

$$\begin{cases} \text{tr}(\dot{\epsilon}) + \frac{\dot{p}}{\chi} = 0 \\ \text{div}(s) - \text{grad}(pI) = 0 \end{cases} \quad (3.3)$$

A ce système d'équation viennent s'ajouter les équations de conditions aux limites applicables aux frontières $\partial\Omega$ du système. Dans notre cas, elles sont de trois types :

- Les frontières libres $\partial\Omega_f$, où les contraintes sont nulles, $\sigma.n = 0$, où n est la normale au contact

- Les frontières à chargement imposé $\partial\Omega_T$, où les contraintes normales sont égales au chargement T imposé, $\sigma.n = T$
- Les frontières à vitesse imposée $\partial\Omega_v$, $v = v_0$ où v_0 est la vitesse imposée

Pour compléter cette définition du système, il faut caractériser le comportement de la matière au cours de la déformation par une loi rhéologique. Cette fonction est assurée par le modèle polycristallin VPSC qui sera détaillé dans la section suivant. La loi polycristalline permet d'écrire le champ de contrainte déviatorique s comme une fonction du taux de déformation $\dot{\epsilon}$, lui-même relié au champ de vitesse v par les relations :

$$s = M_{viscosité}(s)\dot{\epsilon} \quad (3.4)$$

où $M_{viscosité}$ est une matrice de viscosité déduite du calcul VPSC,

$$\dot{\epsilon} = \frac{1}{2}(\text{grad}v^T + \text{grad}v) \quad (3.6)$$

Etant donné la définition de notre système, la formulation forte de notre problème s'écrit alors :

$$\begin{cases} \text{div}(s) - \text{grad}(pI) = 0 & \text{sur } \Omega \\ \text{div}(v) = 0 & \text{sur } \Omega \\ \sigma.n = 0 & \text{sur } \partial\Omega_l \\ \sigma.n = T & \text{sur } \partial\Omega_T \\ v = v_0 & \text{sur } \partial\Omega_v \end{cases} \quad (3.7)$$

Auquel vient s'ajouter la loi de comportement du matériau.

La formulation faible des conditions mixtes en pression et vitesse associée au système mécanique est obtenue par multiplication du système par des fonctions vitesse et pression admissible (v^*, p^*) puis par intégration sur le domaine Ω . Le Principe des Puissances Virtuelles est alors appliqué à la forme faible des équations.

Le problème devient alors :

trouver $(v, p) \in V \times P$ tel que

$$\begin{cases} \int_{\Omega} s(v) : \dot{\varepsilon}(v^*) d\Omega - \int_{\Omega} p \operatorname{div}(v^*) d\Omega - \int_{\partial\Omega} T v^* d(\partial\Omega) = 0 & \forall v^* \in V \\ \int_{\Omega} p^* \left[\operatorname{tr}(\dot{\varepsilon}) + \frac{\dot{p}}{\chi} \right] d\Omega = 0 & \forall p^* \in P \end{cases} \quad (3.8)$$

où $V = (H^1(\Omega))^3$ l'espace de Sobolev des champs cinématiquement admissibles et $P = (L^2(\Omega))$ est l'espace des Lebesgue des fonctions de carré sommable sur le domaine Ω .

L'existence et l'unicité de la solution pour ce problème sont obtenues sous les conditions du théorème de Brezzi-Babuska [Babuska, 1973].

1.2 Discrétisation du problème

1.2.1 Discrétisation spatiale

La discrétisation du problème consiste à résoudre le système (3.7) non pas dans les espaces V et P mais dans des sous espaces discrets de dimension finis V_h et P_h . Ces sous espaces sont basés sur un partitionnement Γ_h du domaine Ω en éléments finis ω_h appelé triangularisation et sont définis par :

$$\Omega = \bigcup_{\omega_h \in \Gamma_h} \omega_h \quad (3.9)$$

Le problème devient alors de trouver les solutions $(v_h, p_h) \in V_h \times P_h$ pour chaque sous-domaine ainsi défini via leur association à des fonctions d'interpolation assurant la relation $V_h \subset V$ et $P_h \subset P$.

Il s'agit désormais de discrétiser le domaine en choisissant une fonction d'interpolation compatible avec les deux inconnues en vitesse et en pression de notre problème. Dans le cadre FORGE2005[®], le choix s'est porté sur l'élément P1+/P1, aussi appelé mini-élément. Il s'agit

d'un élément tétraédrique constitué de 4 nœuds aux sommets et enrichi d'un 5^{ème} nœud en son centre de gravité. Ainsi, le champ de pression est linéaire et continu sur la partie « classique » de l'élément et la vitesse se décompose en une partie linéaire et une partie dite « bulle » correspondant à l'ajout d'un degré de liberté. Ce choix d'éléments permet ainsi de définir une famille de 4 sous- tétraèdres partageant le 5^{ème} nœud comme sommet commun améliorant ainsi la stabilité spatiale et numérique du système (figure 3-1).

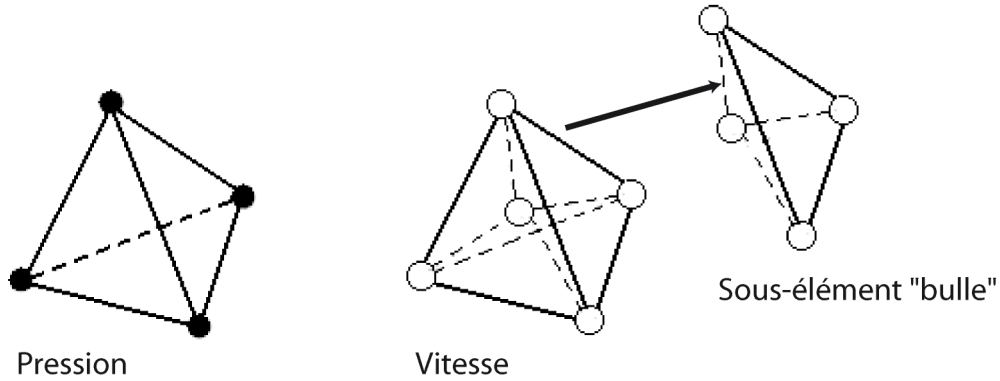


Figure 3-1 : Mini-élément P1+/P1

Les champs de vitesse et de pression discrets s'écrivent alors :

$$\begin{aligned} v_h &= N_k v_k^l + b^l B & k = 1..4, l = 1..3 \\ p_h &= N_k p_k & k = 1..4 \end{aligned} \quad (3.10)$$

où N_k sont les fonctions d'interpolations des champs linéaires vitesse et pression, B la fonction bulle, v_k et p_k les valeurs nodales des champs de vitesse et pression, b la valeur nodale associée au nœud central.

En utilisant cette décomposition du champ de vitesse par une composante linéaire et une composante bulle et en le réintroduisant dans le système (3.7), on obtient alors

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{\Omega} s(v_l + b) : \dot{\epsilon}(v_l^*) d\Omega - \int_{\Omega} p \operatorname{div}(v_l^*) d\Omega - \int_{\partial\Omega} T v_l^* d(\partial\Omega) = 0 \\ \int_{\Omega} s(v_l + b) : \dot{\epsilon}(b^*) d\Omega - \int_{\Omega} p \operatorname{div}(b^*) d\Omega - \int_{\partial\Omega} T b^* d(\partial\Omega) = 0 \\ \int_{\Omega} p^* \operatorname{div}(v_l + b) d\Omega = 0 \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \forall v^* \in V \\ \forall p^* \in P \end{array} \quad (3.10)$$

La dépendance du déviateur des contraintes envers les champs de vitesse linéaire et bulle provoque le couplage du système (3.10) avec la loi de comportement. Cependant, les travaux de [Aliaga, 2000] montrent que le système peut être découplé en utilisant les propriétés du champ bulle qui permettent d'écrire que :

- la contrainte déviatorique peut être séparée en deux composantes, l'une linéaire s_l et l'autre bulle s_b :

$$\int_{\Omega} s(v_l + b) : \dot{\epsilon}(v_l^* + b^*) d\Omega = \int_{\Omega} (s_l + s_b) : \dot{\epsilon}(v_l^* + b^*) d\Omega \quad (3.11)$$

- à partir des propriétés du champ bulle, on démontre que :

$$\int_{\Omega} s_l : \dot{\epsilon}(b^*) d\Omega = \int_{\Omega} s_b : \dot{\epsilon}(v_l^*) d\Omega = 0 \quad (3.12)$$

En utilisant les propriétés (3.11) et (3.12), le système (3.10) s'écrit alors :

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{\Omega} s_l : \dot{\epsilon}(v_l^*) d\Omega - \int_{\Omega} p \operatorname{div}(v_l^*) d\Omega - \int_{\partial\Omega} T v_l^* d(\partial\Omega) = 0 \\ \int_{\Omega} s_b : \dot{\epsilon}(b^*) d\Omega - \int_{\Omega} p \operatorname{div}(b^*) d\Omega - \int_{\partial\Omega} T b^* d(\partial\Omega) = 0 \\ \int_{\Omega} p^* \operatorname{div}(v_l + b) d\Omega = 0 \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \forall v_l^* \in V \\ \forall b^* \in V \\ \forall p^* \in P \end{array} \quad (3.13)$$

Dans cette étude, on considère que la matrice de viscosité définie par la loi rhéologique polycristalline est la même pour le champ de vitesse linéaire et le champ de vitesse bulle, soit :

$$M_{viscosité}^b(s) = M_{viscosité}^l(s) = M_{viscosité} \quad (3.14)$$

D'après (3.4), on peut alors écrire

$$\begin{cases} s_l = M_{viscosité} \dot{\epsilon}(v_l) \\ s_b = M_{viscosité} \dot{\epsilon}(b) \end{cases} \quad (3.15)$$

En remplaçant la contrainte déviatorique par son expression (3.4) et en utilisant la relation (3.14), le système (3.13) devient :

$$\begin{cases} \int_{\Omega} M_{viscosité} \dot{\epsilon}(v_l) : \dot{\epsilon}(v_l^*) d\Omega - \int_{\Omega} p \operatorname{div}(v_l^*) d\Omega - \int_{\partial\Omega} T v_l^* d(\partial\Omega) = 0 & \forall v_l^* \in V \\ \int_{\Omega} M_{viscosité} \dot{\epsilon}(b) : \dot{\epsilon}(b^*) d\Omega - \int_{\Omega} p \operatorname{div}(b^*) d\Omega - \int_{\partial\Omega} T b^* d(\partial\Omega) = 0 & \forall b^* \in V \\ \int_{\Omega} p^* \operatorname{div}(v_l + b) d\Omega = 0 & \forall p^* \in P \end{cases} \quad (3.16)$$

1.2.2 Discrétisation temporelle

Le code éléments finis FORGE2005[®] est écrit sur une formulation Lagrangienne réactualisé. L'intervalle de temps $[t_{initial}, t_{final}]$ est divisé en plusieurs incréments $[t_n, t_{n+1}]$ au cours desquels une petite partie de la déformation est imposée. Les champs de vitesse et de pression à t_{n+1} sont calculés à partir de leur valeurs à l'instant t_n . Un schéma d'intégration temporelle de type Euler explicite est utilisé pour actualiser la configuration :

$$X^{t+\Delta t} = X^t + \Delta t V^t \quad (3.17)$$

où la vitesse V^t est considérée comme constante au cours de l'incrément $t_n + \Delta t$.

1.3 Résolution du système

Pour pouvoir calculer l'évolution de la configuration du système de l'instant t à l'instant $t + \Delta t$, il suffit maintenant de résoudre le système vectoriel non-linéaire (3.16) afin de calculer V^t . Pour cela, réécrivons ce système sous forme matricielle :

$$R(v_l, b, p) = \begin{pmatrix} R_l(v_l, b, p) \\ R_b(v_l, b, p) \\ R_p(v_l, b, p) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.18)$$

avec :

$$\begin{cases} R_l(v_l, b, p) = R_l^l + R_l^p + R_l^c \\ R_b(v_l, b, p) = R_b^b + R_b^p + R_b^c \\ R_p(v_l, b, p) = R_p^l + R_p^v \end{cases} \quad (3.18)$$

où :

$$\begin{cases} R_l^l = \int_{\Omega} M_{viscosité} \dot{\epsilon}(v_l) : \dot{\epsilon}(v_l^*) d\Omega \\ R_l^p = - \int_{\Omega} p \operatorname{div}(v_l^*) d\Omega \\ R_l^c = - \int_{\partial\Omega} T v_l^* d(\partial\Omega) \\ R_b^l = \int_{\Omega} M_{viscosité} \dot{\epsilon}(b) : \dot{\epsilon}(b^*) d\Omega \\ R_b^p = - \int_{\Omega} p \operatorname{div}(b^*) d\Omega \\ R_b^c = - \int_{\partial\Omega} T b^* d(\partial\Omega) \\ R_p^l = \int_{\Omega} p^* \operatorname{div}(v_l) d\Omega \\ R_p^b = \int_{\Omega} p^* \operatorname{div}(b) d\Omega \end{cases} \quad (3.18)$$

Afin de résoudre le système matriciel (3.18), FORGE2005[®] utilise un algorithme de Newton-Raphson. A partir d'un triplet initial $(v_{init}, b_{init}, p_{init})$, il faut trouver une correction $(\Delta v_{init}, \Delta b_{init}, \Delta p_{init})$ telle que le développement de Taylor à l'ordre 1 du résidu R soit nul, soit :

$$R(v_{init} + \Delta v_l, b_{init} + \Delta b, p_{init} + \Delta p) = R(v_{init}, b_{init}, p_{init}) + \frac{\partial R}{\partial v_l} \Delta v_l + \frac{\partial R}{\partial b} \Delta b + \frac{\partial R}{\partial p} \Delta p = 0 \quad (3.20)$$

Le système à résoudre devient alors :

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial R_l}{\partial v_l} & \frac{\partial R_l}{\partial b} & \frac{\partial R_l}{\partial p} \\ \frac{\partial R_b}{\partial v_l} & \frac{\partial R_b}{\partial b} & \frac{\partial R_b}{\partial p} \\ \frac{\partial R_p}{\partial v_l} & \frac{\partial R_p}{\partial b} & \frac{\partial R_p}{\partial p} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta v_l \\ \Delta b \\ \Delta p \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} R_l \\ R_b \\ R_p \end{pmatrix} \quad (3.21)$$

Ce système peut être simplifié en remarquant que les termes $\frac{\partial R_l}{\partial b}$, $\frac{\partial R_b}{\partial v_l}$ et $\frac{\partial R_p}{\partial p}$ sont nuls. Le système s'écrit donc alors,

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial R_l}{\partial v_l} & 0 & \frac{\partial R_l}{\partial p} \\ 0 & \frac{\partial R_b}{\partial b} & \frac{\partial R_b}{\partial p} \\ \frac{\partial R_p}{\partial v_l} & \frac{\partial R_p}{\partial b} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta v_l \\ \Delta b \\ \Delta p \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} R_l \\ R_b \\ R_p \end{pmatrix} \quad (3.22)$$

Soit les trois équations suivantes :

$$\begin{aligned} \frac{\partial R_l}{\partial v_l} \Delta v_l + \frac{\partial R_l}{\partial p} \Delta p &= -R_l \\ \frac{\partial R_b}{\partial b} \Delta b + \frac{\partial R_b}{\partial p} \Delta p &= -R_b \\ \frac{\partial R_p}{\partial v_l} \Delta v_l + \frac{\partial R_p}{\partial b} \Delta b &= -R_p \end{aligned} \quad (3.23)$$

De la deuxième équation, on déduit que :

$$\Delta b = - \left(\frac{\partial R_b}{\partial b} \right)^{-1} \left(R_b + \frac{\partial R_b}{\partial p} \Delta p \right) \quad (3.24)$$

En injectant cette relation dans la troisième équation du système, on peut alors écrire :

$$\frac{\partial R_p}{\partial v_l} \Delta v_l - \frac{\partial R_b}{\partial b} \left(\frac{\partial R_b}{\partial b} \right)^{-1} \frac{\partial R_b}{\partial p} \Delta p = - \left(R_p - \frac{\partial R_b}{\partial b} \left(\frac{\partial R_b}{\partial b} \right)^{-1} R_b \right) \quad (3.25)$$

On pose ensuite $\Delta v_l = \Delta v$ et on définit les matrices suivante :

$$\left\{ \begin{aligned} K^{vv} &= \frac{\partial R_l}{\partial v_l} \\ K^{vp} &= \frac{\partial R_l}{\partial p} \\ K^{pv} &= \frac{\partial R_p}{\partial v_l} \\ K^{pp} &= \frac{\partial R_b}{\partial b} \left(\frac{\partial R_b}{\partial b} \right)^{-1} \frac{\partial R_b}{\partial p} \\ R_v &= R_l \\ R_p &= - \left(R_p - \frac{\partial R_b}{\partial b} \left(\frac{\partial R_b}{\partial b} \right)^{-1} R_b \right) \end{aligned} \right. \quad (3.26)$$

Avec ces nouvelles notations, le système (3.22) s'écrit :

$$\begin{pmatrix} K^{vv} & K^{vp} \\ K^{pv} & -K^{pp} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta v \\ \Delta p \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} R_v \\ R_p \end{pmatrix} \quad (3.27)$$

Le système (3.27) ainsi décrit est indépendant du champ de vitesse associé à la composante bulle. Néanmoins, les contributions des termes du champ bulle restent contenus dans K^{pp} et R_p . Il en résulte un système à 4 inconnues par nœud et par élément (3 pour le champ de vitesse et 1 pour le champ de pression). Cette étape de « condensation de la bulle » permet d'accroître la stabilité du système, et de réduire son nombre de variables.

Le système est résolu par une méthode itérative de type résidu conjugué préconditionné [Marie, 1997]. Le but de cette méthode est de minimiser une fonctionnelle dans laquelle est introduite une matrice de préconditionnement permettant d'accélérer la convergence. Plus de détails sur les méthodes de résolution et de préconditionnement sont disponible dans [Mocellin, 1999; Perchat, 2000; Mocellin et al., 2001].

2 Présentation du modèle VPSC

Le modèle polycristallin retenu pour le couplage est le modèle VPSC [Lebensohn and Tome, 1993]. La présentation du modèle se décompose en deux parties, la première spécifie les équations constitutives à l'échelle du grain et du polycristal et le formalisme inclusionnaire qui permet de prendre en compte l'interaction entre le grain et le milieu environnant, représenté par un milieu homogène équivalent (MHE). La seconde présente la méthode de résolution du modèle.

2.1 Equation mécanique monocristalline et polycristalline

Au cours de la sollicitation mécanique, la déformation plastique est accommodée par le glissement de dislocations selon des directions et des plans de glissement propre au cristal étudié. Ce déplacement des dislocations provoque le cisaillement de la matière. Chaque

système de glissement est défini par deux vecteurs, n , le vecteur normal au plan de glissement, et b , le vecteur de Burgers. A partir de ces deux vecteurs, on définit le tenseur de Schmid du système (sys) par :

$$m_{ij}^{(sys)} = \frac{1}{2}(n_i b_j + n_j b_i) \quad (3.29)$$

La contrainte de cisaillement résolue sur un plan de glissement et dans la direction de glissement du système (sys), $\tau_r^{(sys)}$, s'exprime, en utilisant la notation vectorielle à 5 dimensions précisée précédemment :

$$\tau_r^{(sys)} = m^{(sys)} s' \quad (3.30)$$

On définit aussi, d'une part, le tenseur de vitesses de déformation associé à la vitesse de cisaillement du système (sys), $\dot{\gamma}^{(sys)}$, par :

$$\dot{\epsilon}_k = m_k^{(sys)} \dot{\gamma}^{(sys)} \quad (3.31)$$

et, d'autre part la vitesse de cisaillement $\dot{\gamma}^{(sys)}$ fonction de la contrainte appliquée (3.30) suivant une réponse visqueuse non-linéaire :

$$\dot{\gamma}^{(sys)} = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{\tau_r^{(sys)}}{\tau_c^{(sys)}} \right)^n = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{m_j^{(sys)} s'_j}{\tau_c^{(sys)}} \right)^n \quad (3.32)$$

Où $\dot{\gamma}_0$ est un taux de cisaillement de référence, $\tau_c^{(sys)}$ une valeur seuil de contrainte à partir de laquelle le glissement peut avoir lieu de manière significative et n l'inverse du coefficient de sensibilité à la vitesse.

En réinjectant l'équation (3.32) dans (3.31), on peut alors écrire :

$$\dot{\epsilon}_k = \dot{\gamma}_0 \sum_{sys} m_k^{(sys)} \left(\frac{m_j^{(sys)} s'_j}{\tau_c^{(sys)}} \right)^n \quad k = 1..5 \quad (3.33)$$

où la somme s'opère sur l'ensemble des systèmes de glissement du grain. Cette relation est alors valable pour chaque grain du polycristal.

L'équation (3.33) peut être mise sous forme pseudo-linéaire en définissant un module sécant viscoplastique à l'échelle du cristal $M_{ij}^{c(sec)}$ dépendant de la contrainte s' [Hutchinson, 1976] :

$$\dot{\epsilon}_i = \left(\dot{\gamma}_0 \sum_{sys} \frac{m_i^{(sys)} m_k^{(sys)}}{\tau_c^{(sys)}} \left(\frac{m_j^{(sys)} s'_j}{\tau_c^{(sys)}} \right)^{n-1} \right) s'_k = M_{ij}^{c(sec)}(s') s'_j \quad (3.34)$$

Ce module sécant étant dépendant de la contrainte, l'équation (3.34) est valable uniquement au point $s' - \dot{\epsilon}$ décrivant l'état mécanique du grain. Au voisinage du point $\bar{s}' - \dot{\epsilon}$, on peut, par un développement de Taylor d'ordre 1, définir le module tangent viscoplastique à l'échelle du cristal $M_{ij}^{c(tgt)}$ tel que :

$$\dot{\epsilon}_i = M_{ij}^{c(tgt)}(\bar{s}') s'_j + \dot{\epsilon}_i^0 \quad (3.35)$$

où $\dot{\epsilon}_i^0$ est un taux de déformation de référence, et \bar{s}' la valeur macroscopique ou polycristalline du tenseur des contraintes déviatoriques.

Finalement, si tous les coefficients de sensibilité à la vitesse sont égaux, la relation entre les deux modules viscoplastiques définis à l'échelle du cristal est :

$$M_{ij}^{c(tgt)} = n M_{ij}^{c(sec)} \quad (3.36)$$

Les équations constitutives du polycristal sont équivalentes à celles définies à l'échelle du grain. En posant S' et \dot{E} le tenseur des contraintes et de vitesses de déformation à l'échelle polycristalline, on peut écrire les relations suivantes:

$$\dot{\mathbf{E}}_i = \mathbf{M}_{ij}^{(\text{sec})} (\bar{\mathbf{S}}') \mathbf{S}'_j \quad (3.37)$$

$$\dot{\mathbf{E}}_i = \mathbf{M}_{ij}^{(\text{tgt})} (\bar{\mathbf{S}}') \mathbf{S}'_j + \dot{\mathbf{E}}_0 \quad (3.38)$$

où $\mathbf{M}_{ij}^{(\text{sec})}$ et $\mathbf{M}_{ij}^{(\text{tgt})}$ sont les modules viscoplastique sécant et tangent à l'échelle du polycristal, liés par la relation [Hutchinson, 1976] :

$$\mathbf{M}_{ij}^{(\text{tgt})} = n \mathbf{M}_{ij}^{(\text{sec})} \quad (3.39)$$

En utilisant le formalisme d'Eshelby [Eshelby, 1957], on considère le grain comme une inclusion incorporé dans un milieu équivalent homogène décrit par le comportement mécanique du polycristal, on définit une matrice d'interaction $\tilde{\mathbf{M}}$:

$$\tilde{\mathbf{M}} = n(\mathbf{I} - \mathbf{S})^{-1} \mathbf{S} \mathbf{M}^{(\text{tgt})} \quad (3.40)$$

où \mathbf{S} est le tenseur viscoplastique d'Eshelby déterminé à partir de la forme du grain et du module viscoplastique tangent polycristallin.

On en déduit une équation d'interaction entre le grain et le polycristal :

$$\dot{\mathbf{E}}_i - \dot{\mathbf{E}}_i = -\tilde{\mathbf{M}} (\mathbf{S}'_j - \mathbf{s}'_j) \quad (3.41)$$

Le formalisme ainsi développé permet de lier l'état mécanique microscopique du grain et l'état mécanique macroscopique du polycristal. Néanmoins, cette formulation est limitée puisqu'elle considère que les modules viscoplastiques du grain et du MHE sont connus à l'avance. Une hypothèse simple est de considérer que le comportement du MHE décrit le comportement moyen du polycristal. Il en découle la condition que la moyenne pondérée de l'état mécanique (vitesses de déformation et contraintes) des grains doit être égale aux valeurs correspondantes pour le MHE. Cette condition permet de calculer de manière autocohérente itérative la matrice viscoplastique $\mathbf{M}_{ij}^{(\text{sec})}$.

A partir des équations (3.34) et (3.37), (3.41) peut s'écrire :

$$B^c S' = s' \quad (3.42)$$

où B^c est une matrice d'accommodation définie par :

$$B^c = (M^{c(\text{sec})} + \tilde{M})^{-1} (M^{(\text{sec})} + \tilde{M}) \quad (3.43)$$

On peut alors écrire que :

$$\dot{\epsilon}_i = M_{ij}^{c(\text{sec})} (B^c S') \quad (3.44)$$

En utilisant la condition que le MHE décrit le comportement moyen du polycristal et en posant $\langle \dot{\epsilon}_i \rangle$ la moyenne pondérée des taux de déformation du grain, on écrit que :

$$\dot{E} = \langle \dot{\epsilon}_i \rangle \quad (3.45)$$

En utilisant (3.37) et (3.44),

$$M^{(\text{sec})} S' = \langle M^{c(\text{sec})} B^c \rangle S' \quad (3.46)$$

Soit,

$$M^{(\text{sec})} = \langle M^{c(\text{sec})} B^c \rangle \quad (3.47)$$

La matrice viscoplastique sécante du MHE est donc égale à la somme pondérée des matrices viscoplastiques sécantes des grains corrigée par la matrice d'accommodation B^c . Deux remarques sont à préciser ici, tout d'abord, la matrice viscoplastique sécante polycristalline dépend implicitement de la contrainte macroscopique, l'unicité de la solution n'est donc pas toujours garantie. De plus, la matrice d'accommodation B^c étant elle-même dépendante de la

matrice viscoplastique sécante du grain $M^{c(sec)}$, il convient de déduire $M^{c(sec)}$ de l'équation (3.47) de façon autocohérente.

2.2 Résolution du modèle VPSC

La méthode de résolution des équations définies par le formalisme VPSC qui vient d'être développé utilise un algorithme composé de deux boucles itératives imbriquées. La déformation finale du polycristal est obtenue en imposant un gradient de vitesse de déformation en entrée pendant un intervalle de temps t divisé en plusieurs pas de temps Δt .

Au premier incrément de calcul, les valeurs des contraintes à l'échelle du grain sont calculées par un calcul de type Taylor. Ces valeurs sont utilisées comme valeur d'initialisation au premier pas du calcul autocohérent.

Dans la boucle interne sont calculés par un processus itératif, le module viscoplastique sécant $M^{c(sec)}$ ainsi que le tenseur des contraintes s' pour chaque grain. Le module viscoplastique sécant $M^{(sec)}$ est ensuite calculé en utilisant une moyenne de Voigt sur le module viscoplastique sécant de chaque grain :

$$M^{(sec)-1} = \left\langle M^{c(sec)-1} \right\rangle \quad (3.48)$$

Sont ensuite déterminés, le tenseur viscoplastique d'Eshelby S , la matrice d'interaction \tilde{M} , la matrice d'accommodation B^c . Enfin, l'équation (3.48) est résolue de façon itérative.

Dans la boucle externe, une fois la convergence de la boucle interne vérifiée, le nouveau tenseur des contraintes macroscopique S' est calculé en utilisant la relation (3.37). Le tenseur des contraintes microscopiques s' est ensuite déterminé pour chaque grain en utilisant l'équation d'interaction (3.41). Pour garantir l'autocohérence du calcul, les valeurs des tenseurs des contraintes cristallins s' doivent être compatibles avec les valeurs des matrices viscoplastiques sécantes cristallines imposées $M^{c(sec)}$ au début de la boucle interne. Ainsi, deux conditions de convergence sont imposées :

$$\begin{cases} \left| \langle s'^{(n)} \rangle - S' \right| \leq error \\ \left| \langle s'^{(n)} - s'^{(n-1)} \rangle \right| \leq error \end{cases} \quad (3.49)$$

où l'exposant (n) correspond à l'incrément courant.

Si ces conditions ne sont pas respectées, les valeurs des taux de déformations et contraintes microscopiques sont utilisées pour initialiser le calculer des module viscoplastiques sécants pour chaque grains dans une nouvelle boucle interne.

Une fois la convergence de la boucle externe atteinte, les textures cristallographiques sont réorientées avant le prochain incrément en utilisant la formule suivante pour chaque grain :

$$\dot{\omega} = \dot{\Omega} + \dot{\omega}^{\Delta} - \dot{\omega}^p \quad (3.50)$$

où $\dot{\omega}$ est le taux de rotation du réseau pour chaque grain, $\dot{\Omega}$ la parti antisymétrique du taux de rotation macroscopique, $\dot{\omega}^{\Delta}$ correspond à la réorientation de l'ellipsoïde associée [Lebensohn and Tome, 1993] et $\dot{\omega}^p$ la partie antisymétrique des taux de rotations plastiques sur chaque systèmes de glissement du grain définis par :

$$\dot{\omega}^p = \sum_{sys} \frac{1}{2} (n_i b_j + n_j b_i) \dot{\gamma}^{(sys)} \quad (3.51)$$

2.3 Remaillage

Le modèle éléments finis FORGE2005[®] est doté d'une fonction de remaillage permettant de redéfinir le maillage de la matière afin d'éviter que des éléments dégénèrent (volume de l'élément nul ou négatif) au cours de la déformation. Une fois le nouveau maillage défini, il est nécessaire de transporter de l'ancienne à la nouvelle configuration plusieurs variables de différents types: champs scalaires (pression), champs vectoriels (vitesse) ou champs tensoriels (contraintes) [Coupez, 1991; Coupez et al., 2000]. Cependant, les données microstructurales telles que la texture ne peuvent pas être transportées de la sorte. En effet, l'approche

polycristalline sélectionnée utilise une description statistique de la texture de la matière en définissant des orientations qui ne peuvent être spatialement moyenné. Une méthode de transport des paramètres microstructuraux a été implémentée par [Bérhinger, 2006] en utilisant le concept de particules lagrangiennes. Ce concept a été initialement utilisé par Harlow pour suivre le mouvement de l'interface de deux fluides de densité différentes en utilisant une formulation eulérienne [Harlow and Amsden, 1974].

Cette méthode consiste à placer des particules lagrangiennes, qui suivent l'écoulement de la matière, dans le maillage EF. Le maillage va être de nouveau discrétisé en définissant des cellules de Voronoï centrées sur les particules. Ainsi, la texture de la cellule va être définie sur sa particule associée. Cette texture sera ensuite distribuée à tous les éléments finis constitutifs de la cellule.

3 Stratégie de couplage EF/VPSC

L'objectif du couplage méthode EF/modèle polycristallin est d'utiliser la loi polycristalline VPSC pour définir la loi de comportement du matériau. La relation entre vitesse de déformation et contraintes, précédemment définie (équation 3.4), évolue au cours de la déformation en fonction de l'évolution microstructurale du matériau. La loi rhéologique anisotrope ainsi implémentée va donc évoluer en fonction au cours du chemin mécanique subi par la matière.

3.1 Présentation

Chaque EF, à un incrément donné, fournit un gradient de vitesse au modèle polycristallin qui va calculer les états mécaniques à l'échelle du grain et du polycristal ainsi que l'évolution de la microstructure. Ce calcul va permettre de définir la loi rhéologique utilisée par le code EF pour calculer le nouveau champ mécanique du système.

Il est nécessaire de définir plusieurs paramètres pour le calcul polycristallin autocohérent :

- Une texture initiale pour chaque EF constitutifs du maillage. Celle-ci est composée d'un ensemble d'orientations cristallographiques représentatives, chacune caractérisée par ses angles d'Euler, représentant les trois rotations nécessaires pour

passer du repère polycristallin au repère cristallin, et son poids, correspondant à la fraction volumique de cette orientation au sein du polycristal.

- Un ensemble de systèmes de glissement potentiels associés à leur scission critique résolue $\tau_c^{(sys)}$ et leur coefficient de sensibilité à la vitesse n . Ces valeurs sont dépendantes du milieu environnant (température, pression, environnement chimique...).

3.2 Avantage et inconvénients des couplages fort et faible

Le logiciel EF FORGE2005[®] résout de manière itérative, pour chaque incrément, le système (3.27). Or, afin de pouvoir passer à cette étape, il est nécessaire de connaître la contrainte déviatorique reliée au gradient de vitesse par la loi de comportement du matériau, c'est à dire la loi polycristalline, qui va nous permettre de déterminer la matrice de viscosité $M_{viscosité}$ définie dans l'équation (3.4) et l'état de contraintes du polycristal et donc, de l'EF. Le calcul étant linéaire en vitesse sur un EF, les vitesses de déformation sont y constantes élément. Par conséquent, il n'existe qu'un seul état mécanique $S - \dot{\epsilon}$ pour chaque EF. Il existe deux stratégies d'appel de la loi polycristalline lors du calcul EF, qualifiées de couplage fort et de couplage faible. Ces deux stratégies sont présentées sur la figure 3-2.

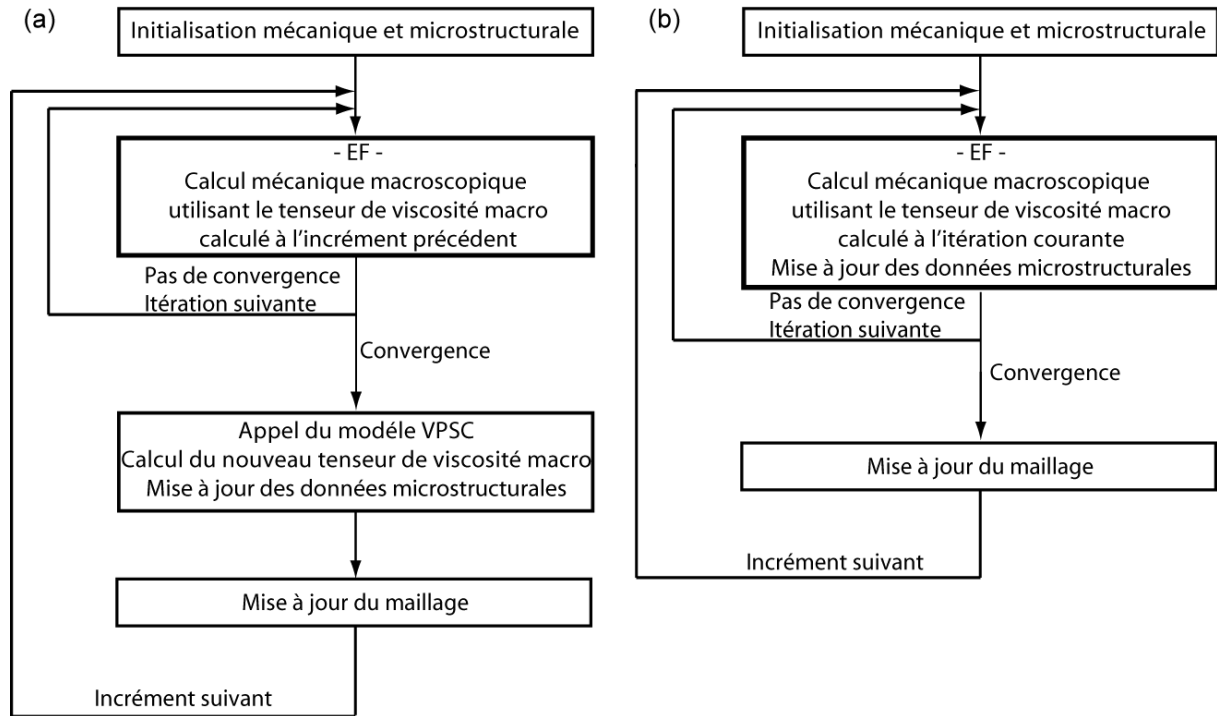


Figure 3-2 : Schéma du principe des couplages a) fort et b) faible

Dans le cas du couplage fort la loi polycristalline est appelée à chaque itération de l'algorithme de convergence (figure 3-2a). Le modèle EF fournit un gradient de vitesses au modèle viscoplastique autocohérent. Les valeurs de la matrice de viscosité, et du tenseur des contraintes déviatoriques sont obtenues directement pour chaque EF par le modèle polycristallin et sont prises respectivement égales à la matrice viscoplastique tangente $M^{(tgt)}$ et au tenseur des contraintes S'_j . Le nombre d'appel à la loi polycristalline va varier d'un incrément à l'autre en fonction du nombre d'itération nécessaire à la convergence, impliquant ainsi un temps de calcul élevé.

Pour le couplage faible, la loi polycristalline n'est appelée qu'une fois par incrément après convergence de l'algorithme de Newton-Raphson. Cette stratégie utilise à chaque incrément de calcul n le module viscoplastique tangent macroscopique $M^{(tgt)}$ calculé à l'incrément $n-1$ par le modèle polycristallin comme matrice de viscosité. La contrainte déviatorique est alors calculée en utilisant la relation (3.15). Cette stratégie est inutilisable au premier incrément de calcul, il est donc nécessaire de faire un calcul avec couplage fort au premier incrément avant de pouvoir appliquer la stratégie de couplage faible. Le nombre d'appels à la loi polycristalline en couplage faible est notablement réduit par rapport à celui du couplage fort. Néanmoins, cette stratégie implique une erreur de calcul dépendante de cohérence de la

valeur du module viscoplastique macroscopique d'un incrément à l'autre. Pour des matériaux de type cubique face centrée, [Bérhinger, 2006] a montré que cette erreur était négligeable, d'autant que les pas de temps utilisés sont souvent de faible amplitude. Cette observation est à confirmer pour des matériaux de symétrie plus faible, une étape de validation des applications aux polycristaux d'olivine est donc nécessaire.

4 Couplage faible, couplage fort et modèle « découplé »

4.1 Validation des méthodes de couplage

Les deux aspects du couplage, fort et faible, ont été validés sur un cas simple de compression axiale selon l'axe X, de 60%, appliquée à un cube composé de 69 EF. Les contraintes sont imposées nulle selon Y et Z. Le frottement sur la face inférieure du cube est nul au cours de l'écoulement de la matière. De plus, pour éviter les effets de rotations libres, le nœud central de la face inférieure est fixé et le nœud central d'une de ses arêtes est bloqué en translation le long de cette arête (figure 3-2). Ce choix de maillage entraîne une déformation légèrement hétérogène à cause du faible nombre d'éléments dans l'épaisseur du cube et des conditions limites utilisées. Néanmoins, celui-ci permet d'obtenir des résultats suffisamment précis pour la validation du couplage et il est surtout très peu consommateur en temps de calcul. En effet, les temps de calculs sont quasi linéairement liés au nombre total d'orientations. Ces derniers sont respectivement de 44 minutes pour le couplage faible et 87 heures pour le couplage fort pour 40 incréments de calcul. Augmenter le nombre d'EF entraînerait des temps de calculs trop longs pour cette étape de validation.

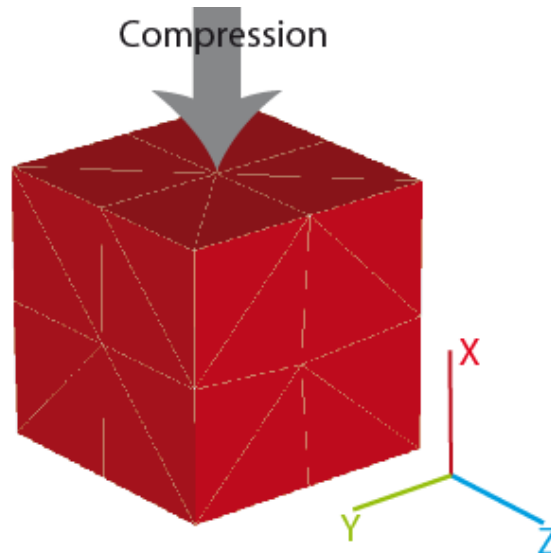


Figure 3-2 : Présentation du cas utilisé pour la validation du couplage

Une version du modèle VPSC non couplé à une méthode EF a déjà été validée dans [Lebensohn and Tome, 1993] et sera utilisée comme cas de référence. Dans la suite du manuscrit, ce modèle sera qualifié de « découplé ».

Une texture initiale isotrope composée de 1000 orientations est utilisée pour chaque élément et dans chacun des calculs.

Les résultats sont comparés en termes:

- d'évolution de la texture globale, soit 1000 orientations pour le modèle découplé et 69 x 1000 orientations pour les modèles couplés
- des valeurs des taux de déformation finaux moyennés sur l'ensemble des EF et normalisés par le taux de déformation équivalent Von Mises final défini par

$$\dot{\epsilon}_{eq} = \sqrt{\frac{2}{3}(\dot{\epsilon}_{ij}\dot{\epsilon}_{ij})}$$

La comparaison de l'évolution de texture pour chaque modèle, présentée sur la figure 3-3, montre des tendances similaires. Une faible différence, de l'ordre de 3,5% sur la concentration maximale des axes [100] est observée pour. La différence pour les autres axes est négligeable. Cette différence est imputable à deux facteurs. D'une part, la déformation n'est pas totalement identique dans chaque maille en raison du faible nombre d'EF ce qui peut créer une légère variation sur la texture globale du cube. D'autre part, le nombre

d'orientations sur les figures de pôles représentées est différent, il est de 1000 orientations pour le modèle découplé et de 69 x 1000 orientations pour les modèles couplés, ce qui peut « lisser » les textures finales.

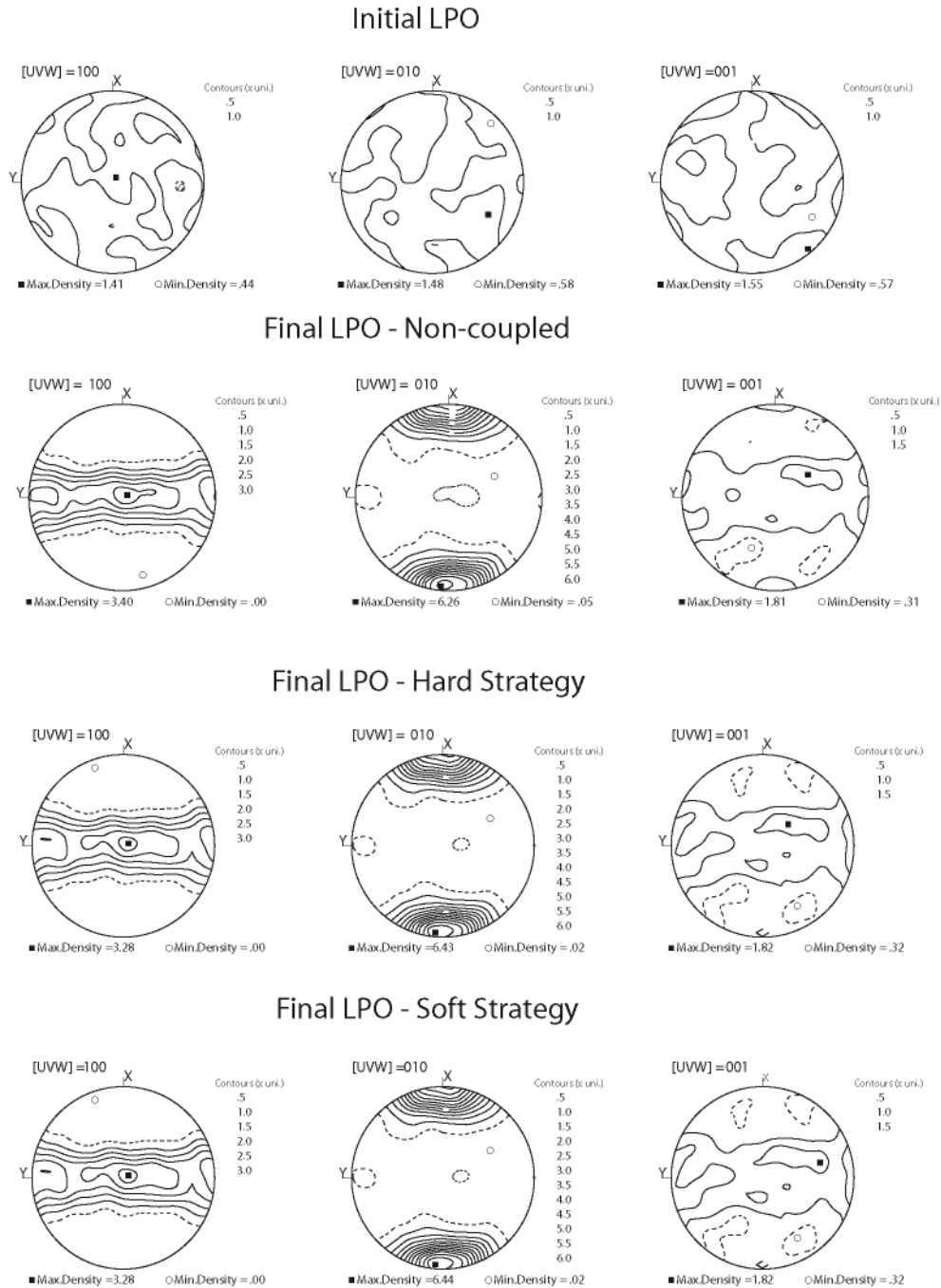


Figure 3-3 : Texture initiale et comparaison des textures finales obtenues pour une compression de 60% calculée avec le modèle découplé, le couplage faible et le couplage fort.

Les composantes du taux de déformations normalisé en fin de compression présentent elles aussi peu de différences. La variation des taux de déformations extensifs et

compressifs $\dot{\epsilon}_{xx}, \dot{\epsilon}_{yy}, \dot{\epsilon}_{zz}$, normalisés et moyennés sur tous les éléments, ne dépassent jamais 1% entre les différents modèles. Le même constat est réalisé pour les composantes de cisaillement $\dot{\epsilon}_{xy}, \dot{\epsilon}_{yz}, \dot{\epsilon}_{zx}$ (tableau 3-1). On observe néanmoins, pour les cas couplés, des déviations dans certains éléments proches des zones d'application des conditions aux limites pouvant atteindre 8%.

	XX	YY	ZZ	XY	YZ	ZX
Soft Strategy	-0,9968	0,4849	0,5120	0,0129	-0,0083	-0,0635
Hard Strategy	-0,9965	0,4841	0,5125	0,0129	-0,0075	-0,0668
Non-coupled	-1,0000	0,4993	0,5007	0,0000	0,0000	0,0000

Tableau 3-1 : Comparaison des taux de déformations obtenus pour une compression de 60% calculée avec le modèle découplé, le couplage faible et le couplage fort.

A la suite de ces cas test, les couplages sont considérés comme validés. Le couplage fort et le couplage faible donnent des résultats similaires pour la prédiction des textures et l'évolution des taux de déformations. Toutefois, même si le couplage fort est physiquement plus rigoureux, il présente le lourd désavantage d'être très consommateur en temps de calculs (figure 3-4)

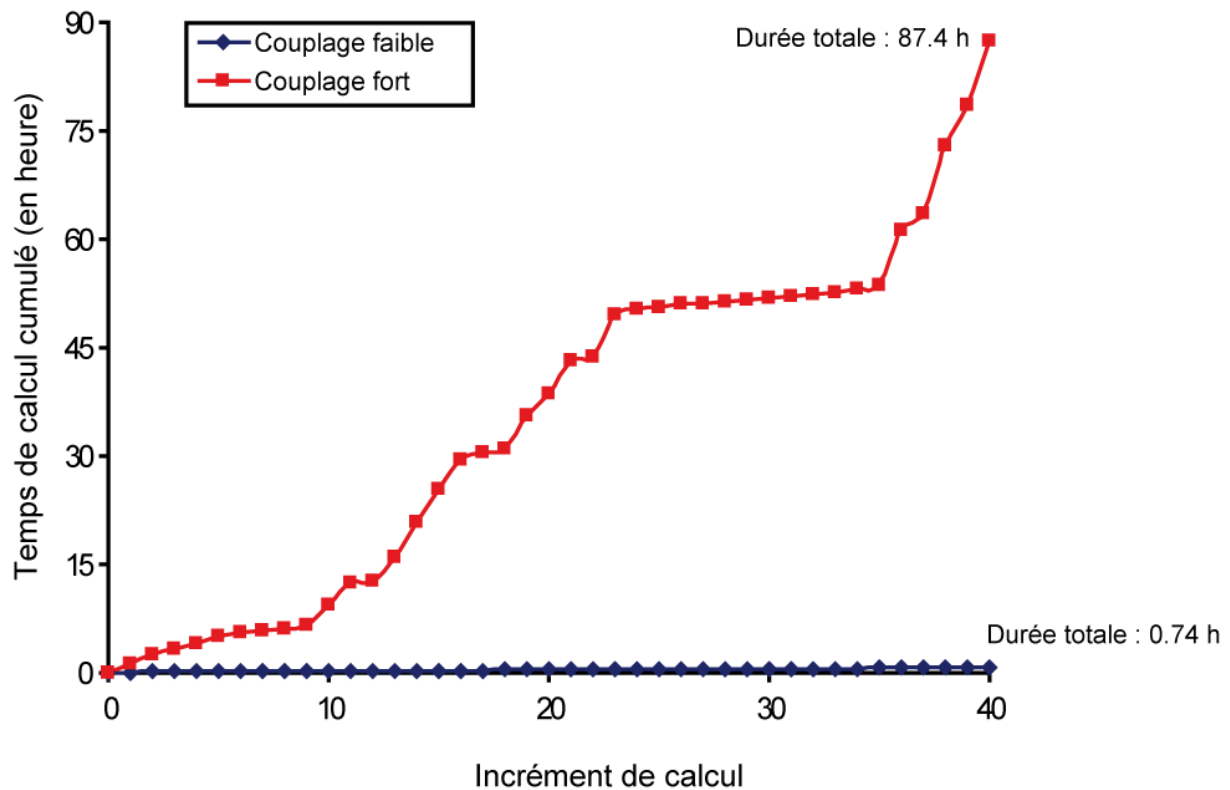


Figure 3-4 : Temps de calcul cumulé pour la simulation d'une compression de 60% calculée avec le modèle le couplage faible et le couplage fort.

4.2 Choix de la méthode de couplage

Afin de déterminer quelle méthode de couplage sera utilisée, 3 nouvelles séries de simulation de compression sur cube de 69 éléments ont été effectuées en couplage fort et faible. Trois textures initiales différentes ont été testées (Figure 3-4). La première (cas 0°) est caractérisée par un alignement des axes [100] parallèles à la direction de compression (X). Les axes [010] et [001] sont respectivement alignés selon Y et Z. La seconde (cas 45°) correspond à une rotation de la première texture initiale de 45° selon l'axe Z. Finalement, la dernière (cas 90°) définie par un alignement des axes [010] parallèles à la direction de compression et des axes [100] et [001] respectivement alignés selon Y et Z, ce qui correspond à une rotation de 90° autour de l'axe Z de la texture initiale du cas 0°. Chacune de ces textures est définie pour un J-index, qui représente l'intégral de la fonction de distribution des orientations [Bunge and Kohler, 1992], de 3.3 (Figure 3-5).

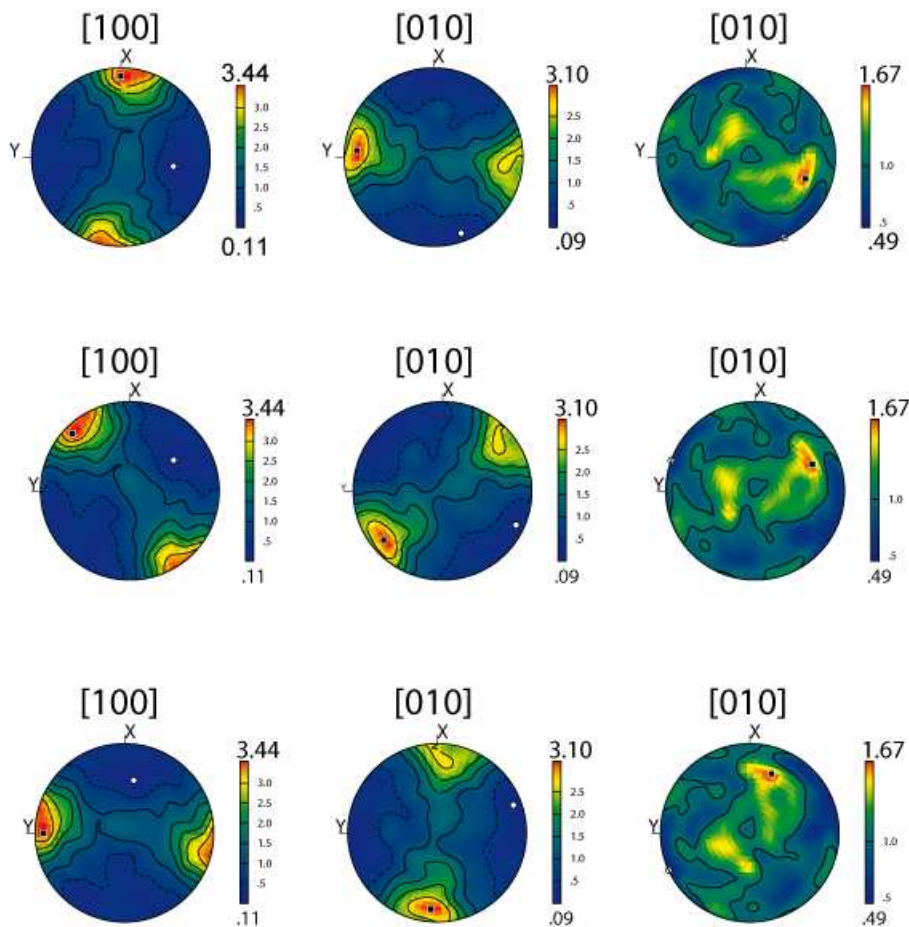


Figure 3-5 : Texture initiale utilisée pour le choix de la méthode de couplage (cas 0°, 45° et 90°).

Les résultats de la prédiction d'évolution de texture après une compression de 45% pour les trois textures initiales sont présentés en figure 3-2 (cas 0°), 3-3 (cas 45°) et 3-4 (cas 90°). Les figures de pôles sont identiques dans les différents cas. On note néanmoins une légère variation de l'intensité de concentration (1.7% maximum) entre les deux approches de couplage.

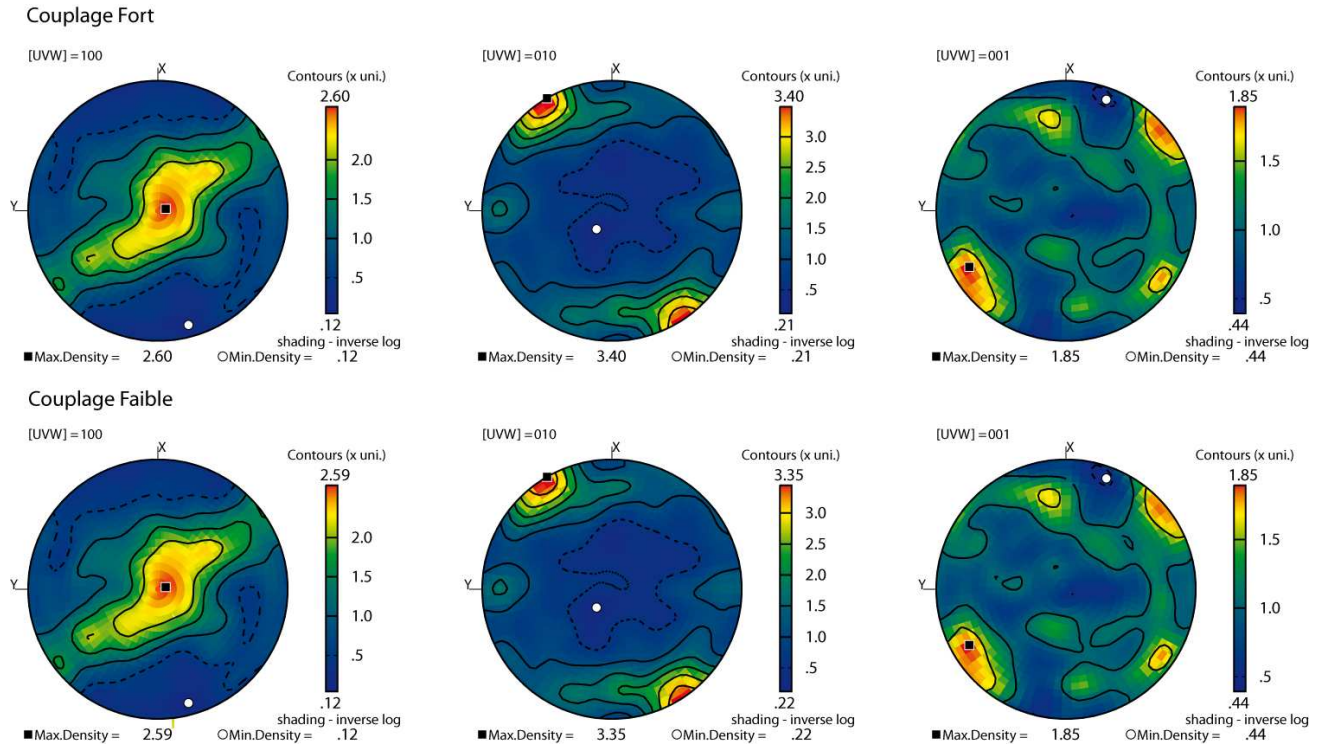
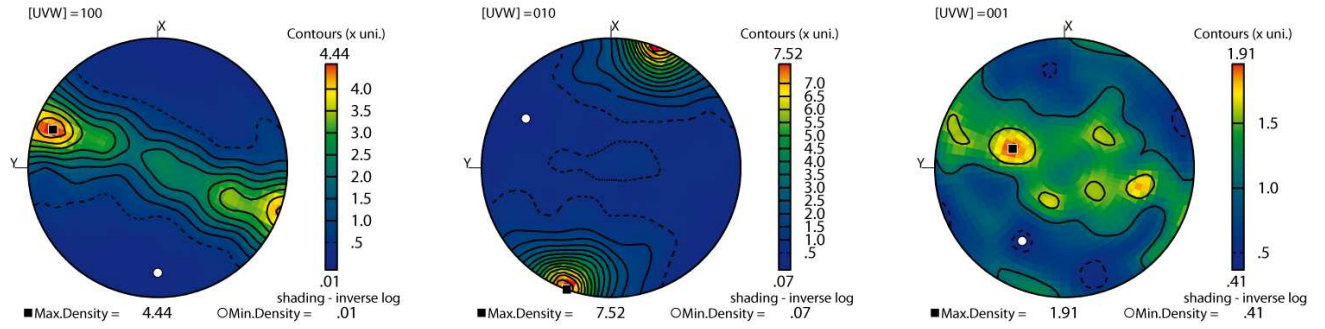


Figure 3-6 : Texture finale du maillage après une compression de 45% (cas 0°)

Couplage Fort



Couplage Faible

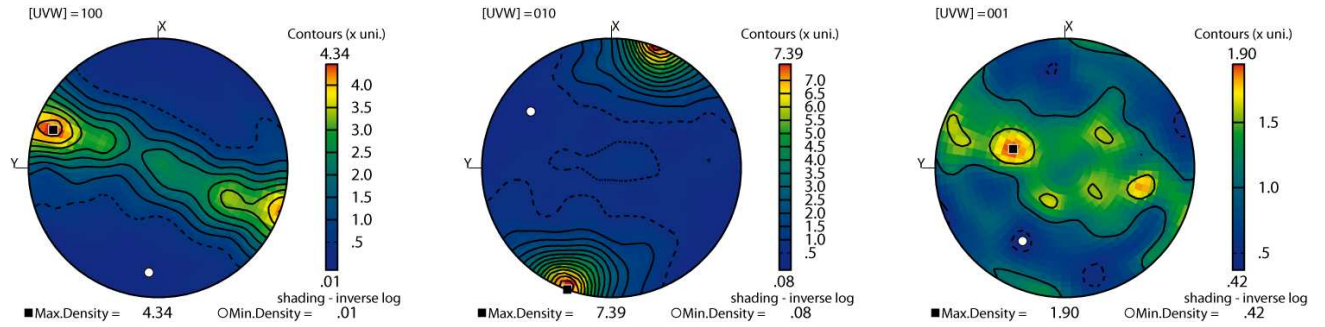
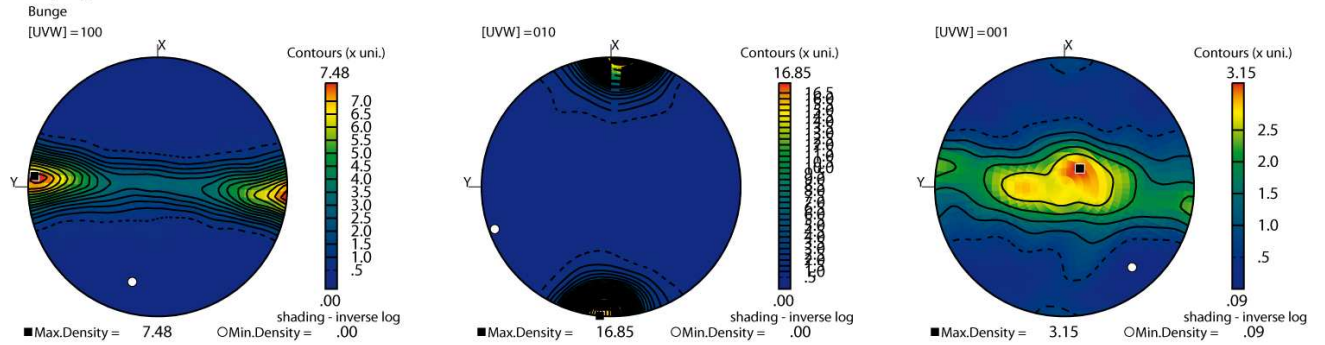


Figure 3-7 : Texture finale du maillage après une compression de 45% (cas 45°)

Couplage Fort



Couplage Faible

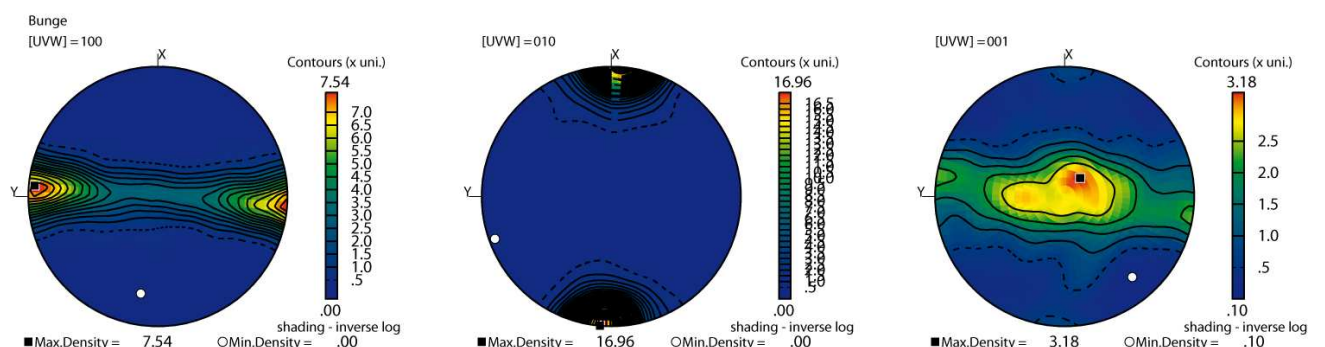


Figure 3-8 : Texture finale du maillage après une compression de 45% (cas 90°)

Pour chacun de ces cas, les taux de déformations finaux moyens et normalisés ainsi que les rapports d'anisotropie $\dot{\epsilon}_{zz} / \dot{\epsilon}_{yy}$ finaux ont été comparés après 45% de compression (tableau 3-2).

		XX	YY	ZZ	XY	YZ	ZX	$\epsilon_{zz} / \epsilon_{yy}$
Cas 0°	Couplage Fort	-0,9940	0,5348	0,4591	0,0856	0,0127	0,0087	0,8584
	Couplage Faible	-0,9947	0,5324	0,4622	0,0809	0,0111	0,0098	0,8682
Cas 45°	Couplage Fort	-0,9110	0,5467	0,3643	-0,3448	0,0049	-0,0185	0,6662
	Couplage Faible	-0,9134	0,5527	0,3608	-0,3387	0,0061	-0,0166	0,6528
Cas 90°	Couplage Fort	-0,8486	0,2949	0,5537	-0,4292	-0,0028	-0,0947	1,8776
	Couplage Faible	-0,8621	0,2942	0,5680	-0,4065	-0,0025	-0,0926	1,9307

Tableau 3-2 : Taux de déformations et rapports d'anisotropie moyens obtenus pour une compression de 45% calculés avec le couplage fort et le couplage faible pour 3 textures initiales différentes (cas 0°, cas 45 et cas 90°).

Les composantes du taux de déformations en fin de compression présentent elles aussi peu de différences. La variation des taux de déformations extensifs et compressifs $\dot{\epsilon}_{xx}, \dot{\epsilon}_{yy}, \dot{\epsilon}_{zz}$, moyennés sur l'ensemble entre le couplage fort et le couplage faible restent minimales (maximum de 1%). Les composantes de cisaillement moyennes $\dot{\epsilon}_{xy}, \dot{\epsilon}_{yz}, \dot{\epsilon}_{zx}$ présentent des variations plus importantes selon le type de couplage utilisé. Toutefois, celles-ci restent dans des valeurs admissibles (différences inférieures à 15% avec des ordres de grandeur 1 à 2 fois plus faibles que les taux de déformations extensifs et compressifs). Le faible nombre d'éléments utilisé pour cette phase de validation peut expliquer l'écart observés sur les composantes des taux de déformations cisailants. La valeur des rapports d'anisotropie moyens est elle aussi peu affectée par le type de couplage, une variation maximale de 2% est observée pour les cas 90°, caractérisé par une forte concentration des textures finales.

4.3 Validation du remaillage

Afin de valider le remaillage, un cas de compression sur cube de 69 éléments, identique à celui présenté dans la section précédente, est utilisé. Une unique particule est placée aléatoirement au sein du maillage, et 69 textures initiales identiques à celle du cas 0° décrit précédemment sont distribuées parmi les éléments. Une méthode de distribution permet de définir dans chaque élément un nombre d'orientations initiales proportionnel au volume de celui-ci. Après 15% de compression, un nouveau maillage est défini grâce au remaillieur automatique intégré dans FORGE2005®. Le maillage final est comparé à la version n'utilisant pas le remaillage et la méthode de distribution des orientations en figure 3-8.

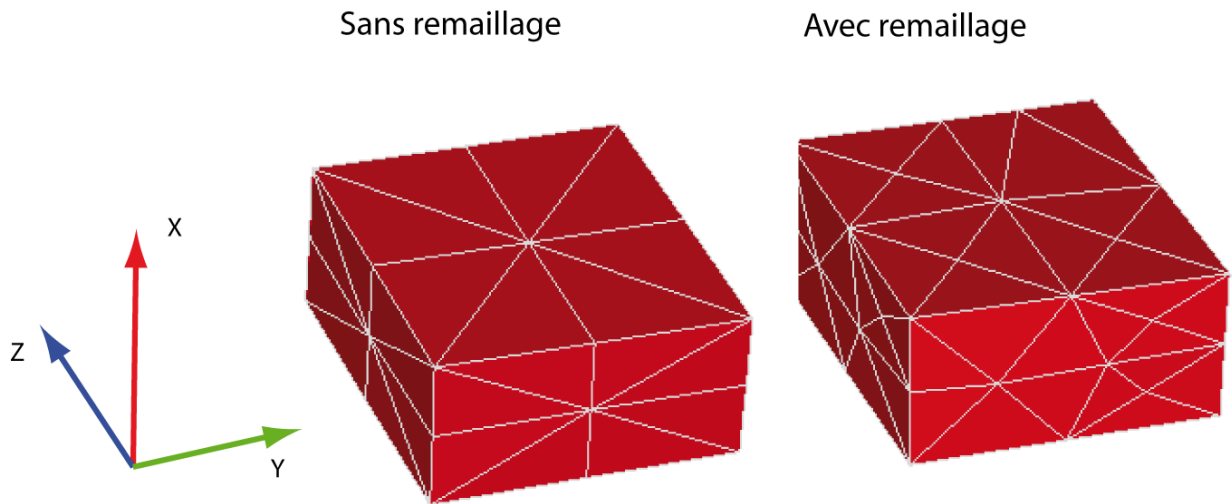


Figure 3-8 : Maillage final après 45 % de compression. A droite, sans remaillage (69 éléments), à gauche, avec remaillage automatique (139 éléments).

L'ensemble des orientations, est avant l'étape de remaillage, stocké au niveau de la particule puis redistribué dans chaque élément du nouveau maillage proportionnellement à leur volume. La texture globale finale (figure 3-9) est peu altérée par le remaillage. Comme pour la comparaison des stratégies forte et faible, une légère différence du maximum de concentration des axes cristallins (2% maximum) est observée mais reste admissible dans notre cas.

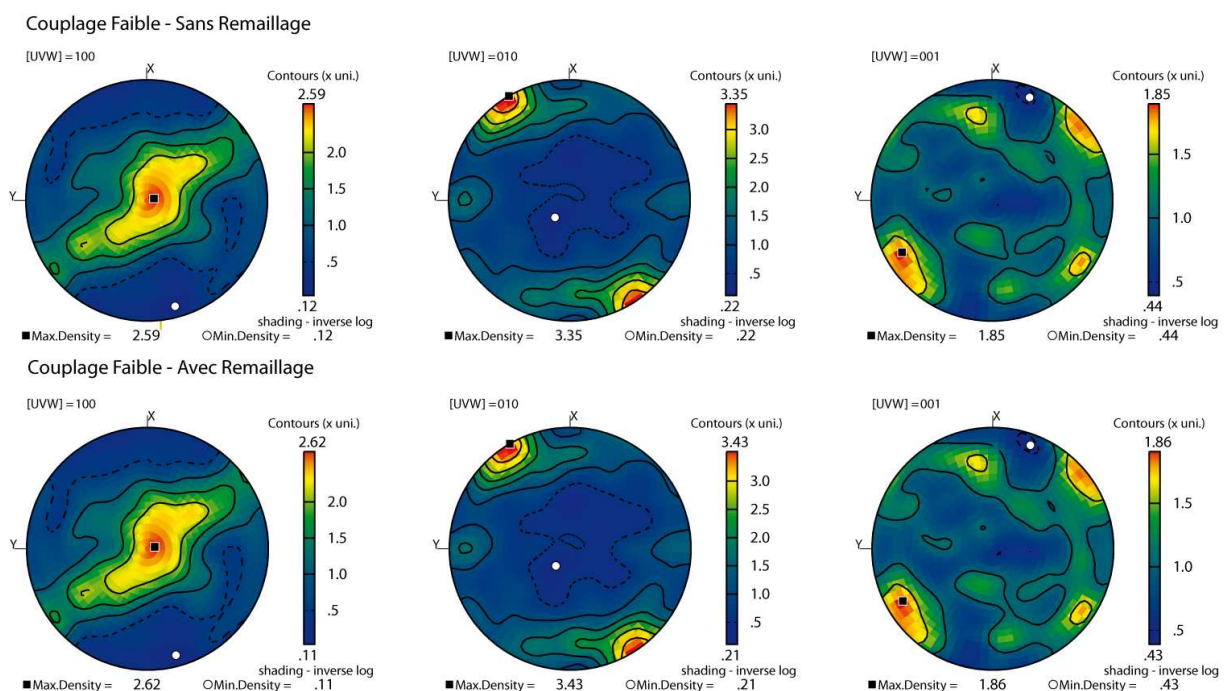


Figure 3-8 : Texture globale finale après 45 % de compression.

Les taux de déformations moyens normalisés ainsi que le rapport d'anisotropie moyen $\dot{\epsilon}_{zz} / \dot{\epsilon}_{yy}$ (tableau 3-3) sont ensuite comparés.

	XX	YY	ZZ	XY	YZ	ZX	$\dot{\epsilon}_{zz} / \dot{\epsilon}_{yy}$
Sans remaillage	-0,9940	0,5349	0,4592	0,0856	0,0127	0,0087	0,8584
Avec remaillage	-0,9941	0,5329	0,4611	0,0827	0,0119	0,0103	0,8653

Tableau 3-3 : Taux de déformations et rapports d'anisotropie moyens obtenus pour une compression de 45% cas 0°) calculés avec le couplage faible en utilisant une version avec et sans remaillage

Les taux de déformations moyens extensifs et compressifs $\dot{\epsilon}_{xx}, \dot{\epsilon}_{yy}, \dot{\epsilon}_{zz}$, ainsi que le rapport d'anisotropie $\dot{\epsilon}_{zz} / \dot{\epsilon}_{yy}$ varient très peu en conséquence du remaillage. Les variations sur les valeurs moyennes finales ne dépassent jamais 1%. Les différences observées sur les taux de cisaillement moyens $\dot{\epsilon}_{xy}, \dot{\epsilon}_{yz}, \dot{\epsilon}_{zx}$ sont plus importantes, de 3% et 6% pour les deux premières et surtout de 15% pour la dernière composante. Il est à noter que la taille des éléments a diminué au cours du remaillage, ce qui peut entraîner une meilleure approximation des taux de cisaillement moyens (nombre de degrés de liberté plus élevé).

5 Conclusion

Ce chapitre a permis de montrer qu'un modèle rhéologique polycristallin viscoplastique et autocohérent associé à une méthode de remaillage garantissant le transport des paramètres polycristallins a été implémenté avec succès dans le code EF FORGE2005[®]. L'originalité de cette approche est de déterminer le tenseur de viscosité macroscopique de manière globale et donc de garantir une approche physique complète de la description de la déformation anisotrope. Néanmoins, cette approche présente aussi l'inconvénient d'être très consommatrice en temps de calculs. La phase de validation a permis de montrer que le couplage faible donnait des résultats satisfaisants aussi bien pour la prédiction des évolutions de textures que pour celle de l'anisotropie mécanique. De plus, la méthode de remaillage implémentée a de la même manière donné de bons résultats. Pour la suite de l'étude, au vu des bons résultats mécaniques et des temps de calculs obtenus en utilisant la méthode de couplage faible, celle-ci a été retenue.

Références bibliographiques

- Aliaga, C. (2000), Simulation numérique par éléments finis 3D du comportement thermomécanique au cours du traitement thermique d'aciers : application à la trempe de pièces forgées ou coulées, *Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, Sophia Antipolis*.
- Babuska, I. (1973), Finite-Element method with penalty, *Math. Comput.*, 27(122), 221-228.
- Bérhingier, M. (2006), Distribution et transport des variables de modèles polycristallins pour la prédiction de l'anisotropie mécanique des métaux en mise en forme, *Thèse de doctorat, Ecole Nationale supérieure des Mines de Paris, Sophia Antipolis*.
- Beringhier, M., et al. (2007), Using Lagrangian particles to efficiently describe microstructure evolution in metal forming - application to texture-induced mechanical anisotropy, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 15(3), 191-204.
- Bunge, H. J., and U. Kohler (1992), Model-calculations of primary recrystallization textures, *Scr. Metall. Materialia*, 27(11), 1539-1543.
- Coupez, T. (1991), Grandes déformations et remaillage automatique, *Thèse de doctorat, Ecole Nationale supérieure des Mines de Paris, Sophia Antipolis*.
- Coupez, T., et al. (2000), Parallel meshing and remeshing, *Appl. Math. Model.*, 25(2), 153-175.
- Eshelby, J. (1957), The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems., *Proceedings of the Royal Society of London Series a-Mathematical and Physical Sciences*, A241, 376-396.
- Harlow, F. H., and A. A. Amsden (1974), Multifluid flow calculations at all mach numbers, *Journal of Computational Physics*, 16(1), 1-19.
- Hutchinson, J. W. (1976), Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline materials, *Proceedings of the Royal Society of London Series a-Mathematical and Physical Sciences*, A348, 101.
- Lebensohn, R. A., and C. N. Tome (1993), A self-consistent anisotropic approach for the simulation of plastic-deformation and texture development of polycrystals - Application to zirconium alloys, *Acta Metallurgica Et Materialia*, 41(9), 2611-2624.
- Loge, R. E., et al. (2007), Reducing computational cost and allowing automatic remeshing in FEM models of metal forming coupled with polycrystal plasticity, paper presented at 9th

International Conference on Numerical Methods in Industrial Forming Processes (NUMIFORM 07), Amer Inst Physics, Oporto, PORTUGAL, Jun 17-21.

Logé, R. E. (1999), Influence des conditions thermomécaniques et de la microstructure sur les évolutions de textures cristallographiques du Zircaloy-4 en mise en forme à chaud, *Thèse de doctorat, Ecole Nationale supérieure des Mines de Paris, Sophia Antipolis*.

Marie, S. (1997), Un modèle de parallélisation S.P.M.D. pour la simulation numérique de procédés de mise en forme des matériaux, *Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, Sophia Antipolis*.

Mocellin, K. (1999), Contribution à la simulation numérique tridimensionnelle du forgeage à chaud. Etude du contact et calcul multigrille, *Thèse de doctorat, Ecole Nationale supérieure des Mines de Paris, Sophia Antipolis*.

Mocellin, K., et al. (2001), Toward large scale FE computation of hot forging process using iterative solvers, parallel computation and multigrid algorithms, *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 52(5-6), 473-488.

Noat, P. (1996), Détermination expérimentale et prise en compte dans un code de calcul par éléments finis de l'anisotropie mécanique d'alliages d'aluminium laminés, *Thèse de doctorat, Ecole Nationale supérieure des Mines de Paris, Sophia Antipolis*.

Perchat, P. (2000), Mini-élément et factorisations incomplètes pour la parallélisation d'un solveur de Stokes 2D. Application au forgeage., *Thèse de doctorat, Ecole Nationale supérieure des Mines de Paris, Sophia Antipolis*.

Chapitre 4 :

A multi-scale approach to model the anisotropic deformation of lithospheric plates

Ce chapitre correspond à l'article *Knoll et al. 2009* soumis à la revue *Geochemistry, Geophysics, and Geosystems (G3)*.

A multi-scale approach to model the anisotropic deformation of lithospheric plates

Mickaël Knoll

Géosciences Montpellier, Université de Montpellier 2 & CNRS, Place E. Bataillon, cc.060, 34095 Montpellier cedex 5, France (knoll@gm.univ-montp2.fr)

CEMEF, Ecole des Mines de Paris, 1, rue Claude Daunesse, BP207, F- 06904 Sophia-Antipolis Cedex, France (mickael.knoll@mines-paristech.fr)

Andréa Tommasi

Géosciences Montpellier, Université de Montpellier 2 & CNRS, Place E. Bataillon, cc.060, 34095 Montpellier cedex 5, France (andrea.tommasi@gm.univ-montp2.fr)

Roland E. Logé

MINES ParisTech, CEMEF - Center of Materials Forming, CNRS UMR 7635, BP 207, 06904 Sophia Antipolis Cedex, France (roland.loge@mines-paristech.fr)

Javier W. Signorelli

IFIR-CONICET, Univerisidad Nacional de Rosario, Bvd. 27 de Febrero 210bis, 2000 Rosario, Argentina (signorel@ifir-conicet.gov.ar)

Abstract

The association of experimental data showing that the plastic deformation of olivine, the main constituent of the upper mantle, is highly anisotropic and the ubiquitous seismic anisotropy in the upper mantle, which indicates that olivine crystals show coherent orientations over scales of tens to hundreds of km, implies that the long-term deformation in the upper mantle is anisotropic. We propose a multi-scale approach, based on a combination of finite-elements and homogenization approaches, to model the deformation of a lithospheric plate while fully considering the mechanical anisotropy stemming from a strain-induced orientation of olivine crystals in the mantle. This multi-scale model explicitly takes into account the evolution of crystal preferred orientations (CPO) of olivine and of the mechanical anisotropy during the deformation. The role of the initial orientation of the CPO relatively to the imposed boundaries conditions and the link between CPO and mechanical anisotropy evolution are investigated in a series of numerical experiments modeling uniaxial extension (X-direction) of lithospheric plate. Different expressions of the mechanical anisotropy are observed. An initial CPO oblique to the extension direction shows high resolved shear stresses on the easy (010)[100] and (001)[100] slip systems resulting in the development of strong shear strain

and, thus, in a transtensional strain accommodation regime. An initial CPO aligned perpendicularly to the extension direction presents a more complex behavior characterized by an inversion of shearing direction and a shortening/thinning strain accommodation that are only observable with evolving CPO models. An initial CPO aligned parallel to the direction extension or an isotropic CPO tends to quickly concentrate and presents as a result a significant geometrical hardening. In all numerical experiments, the CPO-induced anisotropic viscosity causes finally in all tested cases a variation of the ratio between horizontal (Y-direction) shortening and vertical (Z-direction) thinning.

Keywords: anisotropy, olivine, viscous deformation, dislocation creep, crystal preferred orientations, texture, reactivation, structural inheritance, continental plates, extension, lithosphere

1. Introduction

Most natural solids are polycrystalline, which means that they are made up of individual crystals, which are defined by a shape, a size, and the orientation of the crystalline lattice. The presence of a crystal preferred orientation (CPO) often induces a dependence of the physical properties on the direction of sollicitation. This phenomenon is known as anisotropy. For simple sollicitations, such as uniaxial extension or compression, the ratio between the maximum and minimum strain in the plane normal to the direction of the sollicitation is called r-value. When the material is planar, isotropic, orthotropic (invariance of the deformation by three orthogonal planes) or transverse isotropic (invariance of the deformation by rotation around an axis), the r-value fully defines its anisotropy. Another way to characterize an anisotropic rheology during uniaxial compression or tension experiments is to calculate the ratio of the macroscopic equivalent strain relatively to the macroscopic shear strain. This parameter describes the tendency of anisotropic materials to develop strain components, which result in non-parallelism between principal stress axes and principal strain rate axes.

Mechanical anisotropy has been extensively investigated in metallurgy. In metal forming or crash simulations, dealing with mechanical anisotropy during calculation is primordial to predict the final material shape, the evolution of mechanical properties during deformation, damage distribution and failure. For instance, deep drawing of aluminum alloy sheets results in undesirable “earing”, due to lower strengths and hence higher strain rates along $\langle 110 \rangle$ crystallographic directions [Tucker, 1961]. Numerous strategies have been developed to

account for anisotropy during simulations of forming processes. Initial efforts focused on empirical description of yield surfaces based on a generalization of the Von Mises criterion [VonMises, 1913] that was originally designed to approximate the plastic anisotropy of single crystals: the anisotropy coefficients [Hill, 1948a; b]. However, this formulation is only valid for orthotropic materials to which is imposed a stress coaxial to a symmetry axis. Expressions for more complex strain rate states have been developed, but they are still limited to materials with an orthotropic initial texture [Kim *et al.*, 2007]. Coupling this strategy to a finite element model (FEM) is straightforward, but the necessary parameters, in particular the dependence of the shape of the yield surface on the strain are difficult to obtain. There is also no natural description of the anisotropy for large deformations because there is no account for crystallographic texture evolution.

An alternative approach consists in the parameterization of the texture and anisotropy evolution during deformation based on single crystal plasticity models. Ning and Aifantis [Ning and Aifantis, 1996] method, for instance, uses a distribution function of the CPO to define a texture tensor, which is used to model complex loadings on stainless steel. However, this approach is not suitable for modeling the deformation of orthorhombic or even lower symmetry materials, because no simple parameterization for the anisotropy evolution can then be derived. For such materials, the mechanical anisotropy has to be described via an analytical expression of the yield surface derived from a polycrystal plasticity model [Hiwatashi *et al.*, 1998; Habraken and Duchene, 2004; Van Houtte and Van Bael, 2004]. To each integration point of the FEM, is associated a polycrystalline aggregate and a homogenization method is used to link the mechanical states of the crystal and of the polycrystalline aggregate [Dawson *et al.*, 2003]. The mechanical state of each grain is calculated by a crystal plasticity model and, using a given homogenization method, transmitted to the polycrystal. The repetition of this micro-macro calculation at all integration points of the FEM allows to describe the mechanical behavior in the FEM model as a function of the local CPO. This method gives good results in terms of evolution of the CPO and of the induced anisotropy during the deformation process but computation times are important. Different methods have therefore been proposed recently to enhance computation times. Zhao *et al.* [Zhao *et al.*, 2001] and Raabe *et al.* [Raabe *et al.*, 2002] propose the use of texture components, i.e., a small set of discrete and mathematically compact Gaussian texture components, to map the orientation distribution. Béringhier *et al.* [Béringhier *et al.*, 2007; Loge *et al.*, 2007] presented a distribution method of the initial CPO over several elements of the FEM. An important

advantage of the coupled polycrystal plasticity – FEM models relatively to the other approaches is that it allows the study of the plastic anisotropy of low symmetry materials.

Although most minerals, due to their lower symmetry, display a much higher plastic anisotropy than metals, the role of a CPO-induced mechanical anisotropy on the visco-plastic, dislocation creep controlled, deformation has been largely neglected in Earth Sciences. Early works focused on the role of an anisotropic viscosity on the convection geometry. By using a simplified description of an anisotropic viscosity, where the anisotropy is expressed as the ratio between the normal and shear viscosities, which is kept constant in the simulations, these studies concluded that the effect of mechanical anisotropy was minor [*Richter and Daly*, 1978; *Honda*, 1986; *Christensen*, 1987]. Recent studies, which use a similar description of the viscosity, but consider that the anisotropy evolves as a function of the strain, suggest nevertheless that a CPO-induced mechanical anisotropy does affect the time and length scales of convective instabilities [*Muhlhaus et al.*, 2004; *Lev and Hager*, 2008]. Similar conclusions were attained by models using an analytical description of anisotropic viscosity by decomposing the viscosity tensor in an isotropic part and an anisotropic part that depends of the geometry of the crystal [*Pouilloux et al.*, 2007]. This model, applied to ringwoodite, predicts that the flow of the transition zone in the Earth's mantle may be strongly affected by mechanical anisotropy. However, this approach is limited to high symmetry crystal. Finally, *Gillet-Chaulet et al.* [*Gillet-Chaulet et al.*, 2005] developed a micro-macro model for describing the behavior of anisotropic ice assuming it flows as a linearly viscous orthotropic material. The flow law is defined by six parameters and its orthotropic fabric described by an orientation distribution function depending on two parameters, the grain c-axis colatitude and longitude. This model remains limited to transverse isotropic materials. However, all the above models either use a highly simplified description of the anisotropy or are based on analytical developments that limit their application to high symmetry materials. They cannot fully describe the mechanical anisotropy in the upper mantle that is mainly composed of orthorhombic olivine.

An alternative approach is to use a viscoplastic self-consistent polycrystal plasticity model to estimate the mechanical anisotropy that results from preferred orientation of olivine crystals in the upper mantle. [*Tommasi and Vauchez*, 2001] used this approach for studying the reactivation of preexisting collisional structures during the continental rifting process. They showed that a CPO-induced anisotropy results in directional softening, leading to strain

localization and shearing parallel to the preexisting tectonic fabric when the later is oblique to the extensional stresses. However, these early models did not allow for the evolution of the CPO in response to an evolving stress field. They indicate the initial tendency of the system, but do not predict its evolution.

Multi-scale mechanical models similar to those developed in Material Sciences are necessary to fully account for an evolving anisotropic viscosity in the Earth's upper mantle. In the present study, we investigate the role of a CPO-induced mechanical anisotropy on the deformation of the lithospheric plates by coupling a self-consistent polycrystal plasticity model to a Lagrangian finite element formulation. These models allow to fully account for an anisotropic viscosity that evolves as a function of the olivine CPO and hence as a function of the local strain history. They can therefore be used to study the interplay between CPO evolution and anisotropic deformation in the lithospheric mantle.

2. Anisotropy of physical properties in the olivine crystal and in the upper mantle.

Olivine is the major mineral in the upper mantle (50-80%). Its rheology is therefore crucial for both the lithospheric deformation and the mantle convection. Olivine presents an orthorhombic crystallographic symmetry. Analysis of naturally deformed mantle samples from a large variety of geodynamic environments (e.g., [Ben Ismail and Mainprice, 1998; Tommasi *et al.*, 2000; Tommasi *et al.*, 2004; LeRoux *et al.*, 2008; Tommasi *et al.*, 2008] and deformation experiments under a large range of temperatures and pressures (e.g., [Zhang and Karato, 1995; Bystricky *et al.*, 2000; Couvy *et al.*, 2004; Raterron *et al.*, 2007]) suggest that in the upper mantle deforms mainly by dislocation creep. This mode of deformation depends strongly on the crystallographic structure. Dislocations move in well-defined slip systems defined by a glide plane and a direction – the Burgers vector. The ease of activation of a given slip system is given by the Critical Resolved Shear Stress (CRSS), its magnitude depends on the crystal cell parameters and on the strength of the atomic bonds. Low symmetry crystals, like orthorhombic olivine, are highly anisotropic because the total number of slip system is reduced, while CRSS values vary considerably. Compression experiments on olivine single crystals under high-temperature conditions show indeed that strain rates vary by up to 2 orders of magnitude depending on the orientation of the crystal [Durham *et al.*, 1974; Bai *et al.*, 1991]. A direct consequence of this plastic anisotropy is the development of strong CPO during deformation by dislocation creep [Zhang and Karato, 1995; Bystricky *et al.*, 2000;

Tommasi et al., 2000] leading to an anisotropic mechanical behavior at the polycrystal (rock) scale.

The elastic deformation and hence the propagation of seismic waves in olivine are also highly anisotropic [*Abramson et al.*, 1997]. Seismic anisotropy measurements based on the analysis of the splitting of core shear waves [*Silver and Chan*, 1986; *Vinnik et al.*, 1994] or of the variation of surface waves velocities as a function of the propagation (azimuthal anisotropy) or polarization directions [*Montagner*, 1998] are indeed the best tools available to map the mantle deformation. These measurements show that anisotropy is ubiquitous in the uppermost 200 km of the mantle [*Montagner*, 1994; *Wustefeld et al.*, 2008]. They also imply that olivine CPO are coherent over scales ranging from tens to hundreds of km. This, together with the strong plastic anisotropy of olivine, suggests that the long-term mechanical behavior of the shallow mantle should be strongly anisotropic.

Both the mechanical anisotropy and the CPO evolution depend strongly on the potential slip systems and on their critical resolved shear stress (CRSS). However, CRSS are not absolute values; they depend on physical parameters such as temperature, pressure, or deviatoric stresses and on the chemical environment, in particular on the water and oxygen fugacity. In olivine, deformation experiments on olivine single crystals and aggregates, together with transmission electron microscopy observations on naturally and experimentally deformed peridotites show that deformation in the dislocation creep regime is essentially accommodated by glide on $\{0kl\}[100]$ and $\{hk0\}[001]$ systems with (010) and (001) being the most common glide planes. Slip on $[100]$ systems is favored under high temperature, low stress, low pressure and dry conditions (e.g., [*Raleigh*, 1968; *Phakey et al.*, 1972; *Goetze and Kohlstedt*, 1973; *Durham and Goetze*, 1977; *Durham et al.*, 1977; *Darot and Gueguen*, 1981; *Doukhan et al.*, 1984; *Mackwell et al.*, 1985; *Bai et al.*, 1991; *Bai and Kohlstedt*, 1992]), whereas high stress, high pressure, and high water contents favor $[001]$ slip [*Couvy et al.*, 2004; *Mainprice et al.*, 2005; *Jung et al.*, 2006; *Raterron et al.*, 2007]. Based on these data, we propose that deformation in the lithospheric mantle is essentially accommodated by dislocation glide on $\{0kl\}[100]$ systems. Indeed olivine CPO measured in peridotite xenoliths and massifs that sample the upper 200 km of the mantle are well reproduced by polycrystal plasticity simulations that use CRSS derived from high-temperature, low-stress deformation experiments on olivine single crystals [*Wenk et al.*, 1991; *Tommasi et al.*, 2000]. The same CRSS values (Table 1) are therefore used in the present simulations.

TABLE 1

3. Multi-scale modeling of the deformation of anisotropic low-symmetry polycrystalline materials

The deformation of an anisotropic polycrystalline material is modeled by a two-steps scale-transfer approach. The polycrystal mechanical behavior, characterized by an anisotropic viscosity tensor, is obtained from homogenization of individual representative grains behavior, described by single crystal plasticity (slip systems CRSS) using a viscoplastic self-consistent (VPSC) approach [Molinari *et al.*, 1987; Lebensohn and Tome, 1993]. In contrast to the classical models of Taylor-Bishop-Hill [Taylor, 1938] and [Sachs, 1928] that assume that either strain or stresses are homogeneous in the sample, the VPSC model imposes both strain compatibility and stress continuity between grains and their environment. The latter is represented by a Homogeneous Equivalent Medium (HEM), which have the homogenized, calculated properties of the polycrystal..

The VPSC approach considers each crystal as an inhomogeneity embedded in a HEM, in the sense of the Eshelby formalism [Eshelby, 1957]. At the crystal scale, deformation is accommodated by dislocation glide only. The plastic strain rate $\dot{\epsilon}_{ij}$ associated with the shear rate $\dot{\gamma}^s$ in the system (s) is given by:

$$\dot{\epsilon}_{ij} = \sum_{s=1}^{\#sys} m_{ij}^s \dot{\gamma}^s \quad (1)$$

where \mathbf{m}^s is the Schmid tensor of the system (s).

The shear rate induced in a slip system (s) is related to the local deviatoric stress $\boldsymbol{\sigma}'$ tensor by a non-linear viscous response

$$\dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}_0 \frac{\tau_r^s}{\tau_c^s} \left| \frac{\tau_r^s}{\tau_c^s} \right|^{n^s-1} = \dot{\gamma}_0 \frac{m_{ij}^s \sigma'_{ij}}{\tau_c^s} \left| \frac{m_{ij}^s \sigma'_{ij}}{\tau_c^s} \right|^{n^s-1} \quad (2)$$

where $\dot{\gamma}_0, \tau_r^s, \tau_c^s, n^s, \mathbf{m}^s$ are a reference strain rate, the resolved shear stress on the system s , the CRSS, the inverse of the rate sensitivity and the Schmid tensor of the slip system s , respectively.

Substituting (2) into (1) gives the constitutive law for each grain of the polycrystal:

$$\dot{\epsilon}_{ij} = \dot{\gamma}_0 \sum_{s=1}^{\#sys} m_{ij}^s \frac{m_{pq}^s \sigma'_{pq}}{\tau_c^s} \left| \frac{m_{pq}^s \sigma'_{pq}}{\tau_c^s} \right|^{n^s-1} \quad (3)$$

where the sum is carried over all the slip systems in the grain.

The interaction between grains and the HEM leads to the equation

$$\dot{\epsilon}_{ij} - \dot{E}_{ij} = -\tilde{M}_{ijkl} (\sigma'_{kl} - \Sigma'_{kl}) \quad (4)$$

where the microscopic strain rate tensor and stress tensor for each grain ($\dot{\epsilon}, \sigma'$) and the equivalent macroscopic quantities (\dot{E}, Σ') are linked by an interaction tensor $\tilde{\mathbf{M}}$ of 4th order. The VPSC approach allows therefore calculating for a given olivine CPO and an imposed velocity gradient both the texture evolution and the full anisotropic macroscopic viscosity tensor. To maintain reasonable computation times and as a first approach, recrystallisation or grain growth are not considered in the present models.

The second step of the scale-transfer consists in determining the effect of the local CPO-induced anisotropy on the large-scale stress and strain field. The large deformation of the microstructure is modeled using an updated lagrangian framework. In this incremental approach, the total time is discretized such that the body is subjected to small strain increments during each time step $[t, t + \Delta t]$. At time t , the configuration of the body is known and the balance laws of the mechanical problem are solved in that configuration based on stresses calculated at time $t + \Delta t$. The new configuration is then updated using a finite difference scheme, namely an Euler explicit scheme as follows:

$$\mathbf{x}(t + \Delta t) = \mathbf{x}(t) + \mathbf{v}(t)\Delta t, \quad (5)$$

with \mathbf{x} the node coordinate vector and \mathbf{v} the velocity vector solution of the mechanical problem on the current configuration. In this context, the kinematics can be described using eulerian variables, namely the velocity gradient tensor \mathbf{L} :

$$\mathbf{L} = \nabla \mathbf{v} = \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} + \mathbf{W}, \quad (6)$$

where $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$ and \mathbf{W} correspond, respectively, to the strain rate and the spin. Also it should be noted that the stress measure consistent with this approach is the Cauchy stress.

The formulation used is a mixed velocity / pressure formulation based on the separation of Cauchy stress tensor into its deviatoric and volumetric part [*Chenot and Bay*, 1998; *Chenot et al.*, 2002]. The field equations governing the problem are the equilibrium equation and the continuity equation (volumetric response):

$$\begin{cases} \text{div}(\mathbf{s}) - \nabla p = 0 \\ \text{tr} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} + \frac{\dot{p}}{\chi} = 0 \end{cases} \quad (7)$$

with \mathbf{s} and p the deviatoric and the pressure components of the Cauchy stress tensor, and χ the (elastic) bulk modulus.

The formulation of the finite element problem is based on the weak integral form of these equations with the appropriate boundary conditions:

$$\begin{cases} \int_{\Omega} \mathbf{s}(\mathbf{v}) : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{v}^*) d\Omega - \int_{\Omega} p \text{tr} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{v}^*) d\Omega - \int_{\partial\Omega} \mathbf{T} \cdot \mathbf{v}^* dS = 0 \quad \forall \mathbf{v}^* \\ \int_{\Omega} p^* \left(\text{tr} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{v}^*) + \frac{\dot{p}}{\chi} \right) d\Omega = 0 \quad \forall p^* \end{cases} \quad (8)$$

with \mathbf{v}^* and p^* any virtual velocity and pressure field defined over the configuration at time t .

The finite element procedure leads to a global non linear algebraic system of equations for the velocity field \mathbf{v} and the pressure field p . The solution for a specified time interval is

obtained incrementally by discretizing the time interval as mentioned previously. In each time step, the crystal constitutive equations are integrated at the local level and the solution of the global problem is obtained by using a Newton-Raphson scheme.

The finite element spatial discretization is based on the mini-element (P1+/P1) [*Chenot and Bay, 1998*]. The mini-element is a linear isoparametric tetrahedron where a bubble function is added at its center for the velocity field in order to satisfy the Brezzi/Babuska condition, thus ensuring stability [*Brezzi and Fortin, 1991*]. This makes the finite element solver used particularly adapted to metal forming numerical calculations. As linear interpolation is used, there is only one gauss point per element for the integration of the constitutive equations. At the beginning of the simulation, state variables, like crystallographic orientation, are assigned to each element depending on the grain to which it belongs.

The coupling between the homogenization formalism and the FEM formulation is performed through a finite set of crystallographic orientations associated to the integration point of the mesh. At each time increment, the calculated displacement rate (or velocity) gradient tensor in the FEM is used as the boundary condition for the VPSC simulation, leading to CPO evolution and anisotropic rheology. The viscosity tensor η_{ijkl} obtained from the VPSC and the local macroscopic strain tensor $\dot{\mathbf{E}}$ are then used to calculate the new stress field Σ' needed in the FEM scheme:

$$\Sigma'_{ij} = \eta_{ijkl} \dot{E}_{kl} \quad (9)$$

There are two ways of coupling the FEM and the VPSC models, i.e., to use the VPSC macroscopic viscosity tensor to determine the FEM mechanical fields [*Peirce et al., 1982; Aretz et al., 1999*]. The first one (Figure 1) is a strong coupling strategy in which the polycrystal plasticity calculation is performed for each iteration of the FEM iterative procedure. The stress tensor obtained after convergence is thus determined from evolving estimates of the viscosity tensor. The second strategy, known as the loose coupling approach, runs the polycrystalline calculation only at the end of the FEM time increment, after convergence. In this case, the FEM iterative procedure uses the viscosity tensor calculated at the previous time step from the converged velocity gradient field to estimate the stresses. The strong coupling strategy is very stable, but significantly slower. The stability of this loose

coupling strategy is directly linked to the variability of rheological parameters within a time increment. A detailed study of the compression of textured polycrystalline FCC polycrystalline volumes shows that loss of accuracy due to the use of a soft coupling strategy is negligible [Loge *et al.*, 2004]. However, most rock-forming minerals show lower symmetries and hence a higher anisotropy compared to the FCC symmetry.

FIGURE 1

To verify if the use of a loose coupling strategy is also applicable to low-symmetry materials, we compare the results of simulations of 60% compression in the X direction of a cube discretized by 69 FE using both strong and loose coupling strategies (Figure 1). The simulated texture evolution and mechanical behavior are also compared to those predicted by a VPSC model which is not coupled to a FEM formulation. In these tests, an olivine polycrystal characterized by an initially random CPO defined by a set of 1000 orientations is associated to each element of the FEM. The chosen values of CRSS for the considered slip systems are as given in Table 1. For similar conditions, strong coupling computation times (87 hours) are 20 times higher than those for the loose coupling models (44 minutes). Final textures resulting from the two coupling strategies are similar (Figure 2) and reproduce well those predicted by the VPSC approach for a single olivine polycrystal [Tommasi *et al.*, 1999]. They display an axial symmetry relatively to the shortening direction (X-direction), characterized by a concentration of [010] axes around it and a girdle distribution of [100] and [001] axes at high angle to it.

FIGURE 2

Averages over all finite elements of the deviatoric strain rate tensor components normalized by the Von Mises equivalent strain rate, $\dot{\epsilon}_{eq} = \sqrt{\frac{2}{3}(\dot{\epsilon}_{ij}\dot{\epsilon}_{ij})}$, obtained using the strong and loose coupling strategies are compared to the macroscopic deviatoric strain rate predicted by a traditional VPSC calculation (Table 2). For the diagonal components of the normalized deviatoric strain rate tensor ($\dot{\epsilon}_{xx}/\dot{\epsilon}_{eq}, \dot{\epsilon}_{yy}/\dot{\epsilon}_{eq}, \dot{\epsilon}_{zz}/\dot{\epsilon}_{eq}$), average differences between the 3 calculations do not exceed 0.86%. The average differences between the normalized shear strain rate components ($\dot{\epsilon}_{xy}/\dot{\epsilon}_{eq}, \dot{\epsilon}_{yz}/\dot{\epsilon}_{eq}, \dot{\epsilon}_{zx}/\dot{\epsilon}_{eq}$) predicted using the two strategies do not

exceed 8% except for a few elements near the boundaries conditions. Locally, high difference could be observed but they are limited to a few elements, generally close to the boundaries of the mesh. One should note however that these non-diagonal components are 3-5 orders of magnitude smaller than the diagonal ones. The strain rate tensor remains consistent for all the elements of the initial mesh even after 60% deformation in compression. The loose coupling approach is therefore used in all following simulations.

Table 2

4. Modeling the deformation of a homogeneous anisotropic lithospheric plate

All models were run using a plate with normalized dimension (1 x 1 x 0.1) submitted to either a constant extensional stress or a constant extensional velocity parallel to X on the left boundary (Figure 3). Free slip conditions are applied to the opposed boundary, except for a node at its centre that is fixed in all three directions to avoid translation of the plate. The remaining boundaries are free. The present study focuses on the deformation of an anisotropic viscous polycrystalline material. Elastic or thermal effects are not considered.

FIGURE 3

A polycrystal composed of 1000 initially spherical olivine crystals is associated to each element of the FEM mesh. Olivine slip systems, their CRSS and stress exponents are defined in Table 1. In all models the initial CPO is homogeneous over the entire model, but two different initial CPO were tested: a random quasi-isotropic initial olivine CPO (labeled Iso) or an orthorhombic CPO characterized by clear orthogonal maxima of [100], [010], and [001] (Fig. 4). The latter CPO corresponds to the most common olivine CPO pattern observed in naturally and experimentally deformed mantle rocks (see reviews in [Ben Ismail and Mainprice, 1998; Tommasi *et al.*, 2000]). Its intensity (concentration of the crystallographic axes) which may be quantified by the J index [Bunge and Kohler, 1992]) is rather weak ($J=3.3$) relatively to those of naturally deformed mantle rocks, whose J indexes cluster between 6 and 12 [Tommasi *et al.*, 2000]. Three different orientations of this initial non-random CPO relatively to the imposed extension were tested: the [100] maximum is either parallel (models labeled 0°), normal (90° models), or at 45° to the extension direction X. The maximum concentration of [001] is always vertical (Z-direction).

All models were run for a non-dimensional time of 1. The effect of a CPO-induced anisotropy in viscosity is investigated by comparing the final macroscopic deformation (Figure 4), the total extension parallel in the X direction and the evolution of the extensional and shear strain rates normalized by the initial Von Mises equivalent strain rate for an isotropic medium $\dot{\epsilon}_{eq}^0 = \sqrt{\frac{2}{3}(\dot{\epsilon}_{ij}^0 \dot{\epsilon}_{ij}^0)}$ (Figures 5) and of the macroscopic anisotropy r-value $\dot{\epsilon}_{zz} / \dot{\epsilon}_{yy}$ with increasing extensional strain in the different models (Figures 6). The interpretations of the variations in mechanical behavior are further complemented by the analysis of the evolution of the CPO and of the macroscopic mesh in each model (Figure 4).

FIGURE 4

The total macroscopic deformation, recorded by the final mesh shapes (Figure 4), in models in which a constant non-dimensional tensional stress of 1 is applied varies strongly as a function of the initial olivine CPO. The final macroscopic extension ranges from 21% in the 0° case, to 35% in the Iso case, 36% in the 45° case, and 48% in the 90° case. The deformation geometry or strain regime also depends on the initial olivine CPO (Figure 4). While the Iso and 90° cases deform by pure extension in which extension in the X direction is compensated by shortening in the Y and Z directions, the 45° case shows a transtensional deformation regime, in which extension parallel to X is associated with anti-clockwise (sinistral) XY shearing. Deformation in the 0° case is also transtensional, but the extension/shearing ratio is higher.

In all cases the olivine CPO evolves with increasing strain. [100] tend to align in the extension direction, while [010] and [001] form variably developed girdles normal to it. The rate of change of the CPO depends strongly on the orientation of the CPO relatively to the imposed extension. Both 0° and 45° cases result in very strong olivine CPO, but in the latter an obliquity between the olivine CPO and the imposed extension persists even after 45% of extension. The 90° case shows a complex CPO evolution where a fast reorientation of the main crystallographic axes is accompanied by slow concentration of the CPO.

As a consequence of the CPO evolution, deformation regimes are not stationary, as shown by the variations of the deviatoric strain rate tensor components normalized by the initial Von

Mises equivalent strain rate in an isotropic case as a function of the macroscopic extension along the X direction (Figure 5). In all models, deformation is essentially accommodated by extension parallel to the X axis. Except for case Iso which deforms by normal strains only, shear components in the horizontal plane rate ($\dot{\epsilon}_{xy}$) represent in average 1/10 of the extensional strain rates ($\dot{\epsilon}_{xx}$); the other shear components are one order of magnitude smaller than $\dot{\epsilon}_{xy}$. In the Iso case, CPO development results in hardening, recorded by a progressive decrease of the extensional strain rate with increasing strain. A similar behavior is observed in the 0° case, but the decrease in the extension rate is accompanied by an increase of the normalized shear strain rate. The 45° case also presents a monotonic evolution characterized by an increase of the normalized extension rate and a marked decline of the normalized shear rate. In contrast, the 90° case displays a complex evolution of the strain rate tensor. Up to 25% extension, both the normalized extension strain rate and the shearing rate decrease.. The shearing rate attains a null value around 27% of extension. For extensions higher than 25%, the behavior is inversed; the extension rate decreases and the shear rate increases, but the sense of shearing is inversed.

FIGURE 5

The evolution of the r-value allows to further investigate the effect of the CPO on the mechanical behavior of the plate. In the present study, the r-value is expressed as the ratio between the vertical thinning rate $\dot{\epsilon}_{zz}$ and the horizontal shortening rate $\dot{\epsilon}_{yy}$. The Iso case is characterized by slightly faster shortening, giving an initial r-value of 0.95 (the CPO is not completely isotropic) that slightly decreases with increasing strain. A similar behaviour is observed in the 45° case, but the evolution of the CPO with increasing strain results in this case in a reduction of the anisotropy. In contrast, in the 0° case extension in the X direction results in more thinning than shortening and this tendency is reinforced by the strengthening of the CPO with increasing strain; the r-value increases by a factor of 1.3 during the calculation. Finally, the 90° case shows the strongest variation of the r-value, expressing a change from dominant thinning to dominant shortening with increasing strain.

FIGURE 6

To understand how the CPO influences the mechanical behavior of the plate, it is necessary to analyze the evolution of the olivine CPO with increasing strain in the 4 models. A similar tendency, which expresses the influence of the imposed boundary conditions on the strain field and hence on the CPO development, is observed in the 4 models, olivine [100] axes tend to align parallel to the imposed extension direction (X) (Figure 4). However, the rate of CPO concentration or reorientation as well as the actual rotation path for the 3 principal crystallographic axes of olivine vary significantly from one case to another. The Iso case shows the typical CPO evolution for olivine polycrystals submitted to an axial extension: [100], which is the Burgers vector for the 2 easy slip systems (Table 1), tends to align in the direction of the imposed extension, while [010] and [001] form a wide girdle normal to it, with a better organization of [010]. Only concentration of the CPO with no reorientation is observed in the 0° case, because the initial orientation is already very close to the "equilibrium" orientation. In contrast, the 45° case is characterized by both a clockwise rotation of the CPO leading to a decrease of the angle between the maximum concentration of [100] and the extension direction (X) and a strengthening of the CPO. Finally, the 90° case presents a unique, two-stage CPO evolution (Figure 7).

FIGURE 7

The first stage is characterized by a fast reorientation of the CPO, which aligns the maximum concentration of [010] in the Z direction, and by a slight decrease of its strength induced by strain rate decline. The dispersion of the CPO is probably due to strongly different behaviors of grains with initially similar orientations. Indeed, in this case, most grains were in hard orientations at the start of the simulation, because [010] is not a common Burgers vector in olivine, and hence small variations in resolved shear stresses have a strong effect on the crystals mechanical behavior. This stage is then followed by a slow rotation of the [100] axes towards the imposed extension direction (X).

5. Discussion

Analysis of the 4 simple models presented in this work shows that for low-symmetry materials, such as olivine and most rock-forming minerals, the orientation of the constituent crystals is a first-order parameter controlling the behaviour of a polycrystal. Significantly different mechanical responses are observed as a function of the orientation of the initial

olivine CPO relatively to the solicitation even for a homogeneous, 100% olivine plate submitted to simple boundary conditions.

In the Iso case, the CPO develops in response to the applied extension; it is therefore symmetrically arranged relatively to the extension direction (Figure 4). In consequence, the sole expression of a CPO-induced anisotropic viscosity is a significant hardening, expressed by the decrease in strain rates with increasing strain. No shearing develops and shortening and thinning rates are similar. The observed hardening is essentially geometrical. The CPO evolution, characterized by a progressive rotation of the [100] axis of olivine crystals towards the extension direction, results in a decrease of the resolved shear stresses on the easy (010)[100] and (001)[100] slip systems (Table 1) and hence in a decrease of strain rate in a model with constant stress boundary conditions.

The same mechanism results in a higher strength (or lower strain rates) in the 0° case relatively to the Iso model. With increasing strain, this CPO becomes more concentrated, without significant reorientation of the maxima, leading to further hardening. The orthorhombic symmetry of the initial olivine CPO induces a variation between the horizontal shortening and vertical thinning rates. Predominance of thinning, indicated by the observed positive r -values, is coherent with the higher activation of the (001)[100] system relatively to the (010)[100] one (Figure 5). Finally, the slight asymmetry in the initial CPO (Figure 4) explains the development of dextral shearing (Figure 5).

The effects of a CPO-induced anisotropic viscosity are even more marked in the 45° case. The strong obliquity of the initial CPO relatively to the imposed extension results in high resolved shear stresses on the easy (010)[100] and (001)[100] slip systems (Table 1) and hence in low strength of the plate. It also produces a strong sinistral (counterclockwise) shearing. However, the imposed extension leads to reorientation of the CPO. [100] progressively rotates towards the extension direction (X) and the [010] and [001] axes tend to form a girdle normal to it. This reorientation decreases the obliquity between the CPO and the imposed extension, leading to lower resolved shear stresses on the easy slip systems and hence to progressive hardening of the plate, expressed by the decrease in strain rates with increasing strain (Figure 5). The reorientation of the CPO also leads to a decrease of the mechanical anisotropy (r -value tends toward 1).

Finally, the 90° case shows a complex textural evolution which results in a non-monotonic evolution of the mechanical behavior of the plate. The initial rotation of the maximum concentration of [010] from the Y to the Z direction results in a change of the ratio between shortening and thinning rates, expressed by the variation of the r-value (Figure 6). During this stage, the CPO intensity is slightly weakened and hence the plate strength decreases slightly. This is followed by a progressive rotation of the [100] axes towards the extension direction that results initially in geometrical weakening of the plate. This behavior will be inversed, leading to hardening, once the angle between the [100] concentration and the imposed stress direction becomes smaller than 45°. The observed shearing results essentially, as in the 0° case, from the departure from a perfect orthorhombic symmetry of the initial CPO.

Even in the simple case analyzed here, that is, a homogeneous plate submitted to a constant extension normal to one of its boundaries, the variation in strength and deformation regimes for 4 different initial olivine CPO highlights the importance of accounting for an evolving CPO-induced anisotropy in geodynamical models. The variations in strength imply that domains with different olivine CPO in the mantle will deform at different strain rates, i.e., that variation in olivine CPO may lead to strain localization. In addition, the present models show that even a slight obliquity of the CPO relative to the solicitation direction results in development of significant shearing. Indeed, the 45° case that has the strongest obliquity deforms by an association of extension and shearing, i.e., in a transtensional deformation regime. The present models confirm therefore the conclusions of previous studies, i.e. a CPO-induced mechanical anisotropy in the lithospheric mantle may explain the reactivation of preexisting lithospheric structures during rifting [Vauchez *et al.*, 1998; Tommasi and Vauchez, 2001]. They are also in agreement with the prediction by these studies that the reactivation of preexisting structures oblique to the extension direction should be characterized by a transtensional deformation, as observed, for instance, in the initial stages of the East Gondwana fragmentation [Krabbendam and Barr, 2000], and in the early stages of the East African rift and Rhine graben development [Glahn *et al.*, 1993; Ring, 1994; Theunissen *et al.*, 1996; Walker *et al.*, 2004; Chorowicz, 2005].

6. Conclusion

Anisotropy of physical properties in polycrystalline materials, like rocks or at a larger scale the Earth's mantle, is a fully multi-scale problem. The large-scale "polycrystal" anisotropy

depends on both the intrinsic anisotropy of the crystal and on the orientation of the crystals that compose this polycrystal. The present study shows that multi-scale mechanical models, which couple a viscoplastic self-consistent (VPSC) description of the polycrystal plasticity to 3D finite-element models that simulate the large-scale flow, allows to perform accurate calculation of the extension of lithospheric plate accounting for intrinsic mechanical anisotropy. The originality of this method is to use the VPSC approach to fully determine the viscosity tensor, based on the local CPO and mechanical state, and, hence, to be able of accounting for its evolution during the deformation history. These coupled models allow therefore an accurate calculation of the evolution of the CPO and of the microscopic and macroscopic mechanical states. A major advantage of this method is that it is applicable to all crystalline materials, independent of their symmetry. The simple models presented here highlight that a CPO-induced anisotropy in viscosity in the mantle is a first order parameter for the deformation of the plate, controlling not only the strain distribution, but also the deformation regime. This mechanism may thus both contribute to strain localization in natural geological systems and explain the high proportion of shearing in these systems.

References

- Abramson, E. H., et al. (1997), The elastic constants of San Carlos olivine to 17 GPa, *Journal of Geophysical Research-Solid Earth*, 102(B6), 12253-12263.
- Aretz, H., et al. (1999), Integration of physically based models into FEM and application in simulation of metal forming processes, paper presented at Workshop on Integral Materials Modelling, Iop Publishing Ltd, Aachen, Germany, Oct 06.
- Bai, Q., et al. (1991), High-temperature creep of olivine .1. Mechanical results for buffered samples, *Journal of Geophysical Research-Solid Earth and Planets*, 96(B2), 2441-2463.
- Bai, Q., and D. L. Kohlstedt (1992), High-temperature creep of olivine single-crystals .2. Dislocation-structures, *Tectonophysics*, 206(1-2), 1-29.
- Ben Ismail, W., and D. Mainprice (1998), An olivine fabric database: an overview of upper mantle fabrics and seismic anisotropy, *Tectonophysics*, 296(1-2), 145-157.
- Beringhier, M., et al. (2007), Using Lagrangian particles to efficiently describe microstructure evolution in metal forming - application to texture-induced mechanical anisotropy, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 15(3), 191-204.
- Brezzi, F., and M. Fortin (1991), Mixed and hybrid finite elements methods, *Series in Computational Mathematics*, 15.
- Bunge, H. J., and U. Kohler (1992), Model-calculations of primary recrystallization textures, *Scr. Metall. Materialia*, 27(11), 1539-1543.
- Bystricky, M., et al. (2000), High shear strain of olivine aggregates: Rheological and seismic consequences, *Science*, 290(5496), 1564-1567.
- Chenot, J. L., and F. Bay (1998), An overview of numerical modelling techniques, *J. Mater. Process. Technol.*, 80-1, 8-15.
- Chenot, J. L., et al. (2002), Numerical treatment of contact and friction in FE simulation of forming processes, paper presented at 9th International Conference on Metal Forming (METAL FORMING 2002, Elsevier Science Sa, Birmingham, England, Sep 09-11.
- Chorowicz, J. (2005), The East African rift system, *Journal of African Earth Sciences*, 43(1-3), 379-410.
- Christensen, U. R. (1987), Some geodynamical effects of anisotropic viscosity, *Geophysical Journal of the Royal Astronomical Society*, 91(3), 711-736.
- Couvy, H., et al. (2004), Shear deformation experiments of forsterite at 11GPa-1400 degrees C in the multianvil apparatus, *European Journal of Mineralogy*, 16(6), 877-889.

- Darot, M., and Y. Gueguen (1981), High-temperature creep of forsterite single-crystals, *Journal of Geophysical Research*, 86(NB7), 6219-6234.
- Dawson, P. R., et al. (2003), Advances in sheet metal forming analyses: dealing with mechanical anisotropy from crystallographic texture, *International Materials Reviews*, 48(2), 86-122.
- Doukhan, N., et al. (1984), A TEM microstructural study of experimentally deformed Anita Bay dunite, in *Deformation of Ceramics II*, edited by R.E. Trexler and R.C. Bradt, New York, 307-319.
- Durham, W. B., et al. (1974), Plastic flow of single-crystal olivine, *Transactions-American Geophysical Union*, 55(12), 1194-1194.
- Durham, W. B., and C. Goetze (1977), Plastic flow of oriented single-crystals of olivine .1. Mechanical data, *Journal of Geophysical Research*, 82(36), 5737-5753.
- Durham, W. B., et al. (1977), Plastic flow of oriented single-crystals of olivine .2. Observations and interpretations on dislocation-structures, *Journal of Geophysical Research*, 82(36), 5755-5770.
- Eshelby, J. (1957), The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems., *Proceedings of the Royal Society of London Series a-Mathematical and Physical Sciences*, A241, 376-396.
- Gillet-Chaulet, F., et al. (2005), A user-friendly anisotropic flow law for ice-sheet modelling, *J. Glaciol.*, 51(172), 3-14.
- Glahn, A., et al. (1993), Southern Rhine graben - Small-wavelength tomographic study and implications for the dynamic evolution of the graben, *Geophysical Journal International*, 113(2), 399-418.
- Goetze, C., and D. L. Kohlstedt (1973), Laboratory study of dislocation climb and diffusion in olivine, *Journal of Geophysical Research*, 78(26), 5961-5971.
- Habraken, A. M., and L. Duchene (2004), Anisotropic elasto-plastic finite element analysis using a stress-strain interpolation method based on a polycrystalline model, *International Journal of Plasticity*, 20(8-9), 1525-1560.
- Hill, R. (1948a), A theory of the yielding and plastic flow of anisotropic metals, *Proceedings of the Royal Society of London Series a-Mathematical and Physical Sciences*, 193(1033), 281-297.
- Hill, R. (1948b), A variational principle of maximum work in classical plasticity, *Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics*, 1(1), 18-28.

- Hiwatashi, S., et al. (1998), Prediction of forming limit strains under strain-path changes: Application of an anisotropic model based on texture and dislocation structure, *International Journal of Plasticity*, 14(7), 647-669.
- Honda, S. (1986), Strong anisotropic flow in a finely layered asthenosphere, *Geophysical Research Letters*, 13(13), 1454-1457.
- Jung, H., et al. (2006), Effect of water and stress on the lattice-preferred orientation of olivine, *Tectonophysics*, 421(1-2), 1-22.
- Kim, D., et al. (2007), Non-quadratic anisotropic potentials based on linear transformation of plastic strain rate, *International Journal of Plasticity*, 23(8), 1380-1399.
- Krabbendam, M., and T. D. Barr (2000), Proterozoic orogens and the break-up of Gondwana: why did some orogens not rift?, *Journal of African Earth Sciences*, 31(1), 35-49.
- Lebensohn, R. A., and C. N. Tome (1993), A self-consistent anisotropic approach for the simulation of plastic-deformation and texture development of polycrystals - Application to zirconium alloys, *Acta Metallurgica Et Materialia*, 41(9), 2611-2624.
- LeRoux, V., et al. (2008), Feedback between melt percolation and deformation in an exhumed lithosphere-asthenosphere boundary., *Earth and Planetary Science Letters*, *In press*.
- Lev, E., and B. H. Hager (2008), Prediction of anisotropy from flow models: A comparison of three methods, *Geochemistry Geophysics Geosystems*, 9, 13.
- Loge, R. E., et al. (2004), Decreasing computation time in finite element simulations coupled with polycrystalline plasticity, in *Materials Processing and Design: Modeling, Simulation and Applications, Pts 1 and 2*, edited by S. Ghosh, et al., pp. 1754-1759, Amer Inst Physics, Melville.
- Loge, R. E., et al. (2007), Reducing computational cost and allowing automatic remeshing in FEM models of metal forming coupled with polycrystal plasticity, paper presented at 9th International Conference on Numerical Methods in Industrial Forming Processes (NUMIFORM 07), Amer Inst Physics, Oporto, PORTUGAL, Jun 17-21.
- Mackwell, S. J., et al. (1985), The role of water in the deformation of olivine single-crystals, *Journal of Geophysical Research-Solid Earth and Planets*, 90(NB13), 1319-1333.
- Mainprice, D., et al. (2005), Pressure sensitivity of olivine slip systems and seismic anisotropy of Earth's upper mantle, *Nature*, 433(7027), 731-733.
- Molinari, A., et al. (1987), A self-consistent approach of the large deformation polycrystal viscoplasticity, *Acta Metallurgica*, 35(12), 2983-2994.
- Montagner, J. P. (1994), Can seismology tell us anything about convection in the mantle, *Reviews of Geophysics*, 32(2), 115-137.

- Montagner, J. P. (1998), Where can seismic anisotropy be detected in the earth's mantle? In boundary layers, *Pure and Applied Geophysics*, 151(2-4), 223-256.
- Muhlhaus, H. B., et al. (2004), Emergent anisotropy and flow alignment in viscous rock, *Pure and Applied Geophysics*, 161(11-12), 2451-2463.
- Ning, J., and E. C. Aifantis (1996), Anisotropic yield and plastic flow of polycrystalline solids, *International Journal of Plasticity*, 12(10), 1221-1240.
- Peirce, D., et al. (1982), An analysis of nonuniform and localized deformation in ductile single-crystals, *Acta Metallurgica*, 30(6), 1087-1119.
- Phakey, P., et al. (1972), Transmission electron microscopy of experimentally deformed olivine crystals, in *Flow and fracture of rocks*, *Geophys. Monogr. Ser.*, edited by H.C. Heard et al., AGU, Washington, D.C., 16, 117-138.
- Pouilloux, L., et al. (2007), Anisotropic rheology of a cubic medium and implications for geological materials, *Geophysical Journal International*, 170(2), 876-885.
- Raabe, D., et al. (2002), Concepts for integrating plastic anisotropy into metal forming simulations, *Adv. Eng. Mater.*, 4(4), 169-180.
- Raleigh, C. B. (1968), Mechanisms of plastic deformation of olivine, *Journal of Geophysical Research*, 73(16), 5391-&.
- Raterron, P., et al. (2007), Pressure-induced slip-system transition in forsterite: Single-crystal rheological properties at mantle pressure and temperature, *Am. Miner.*, 92(8-9), 1436-1445.
- Richter, F. M., and S. F. Daly (1978), Convection models having a multiplicity of large horizontal scales, *Journal of Geophysical Research*, 83(NB10), 4951-4956.
- Ring, U. (1994), The influence of preexistin structure on the evolution of the Cenozoic Malawi Rift (East-African Rift System), *Tectonics*, 13(2), 313-326.
- Sachs, G. (1928), Zur Ableitung einer Fließbedingung, *Z. Ver. Deut. Ing.*, 72(8), 734-736.
- Silver, P. G., and W. W. Chan (1986), Observations of body wave multipathing from broadband seismograms - Evidence for lower mantle slab penetration beneath the Sea of Okhotsk, *Journal of Geophysical Research-Solid Earth and Planets*, 91(B14), 13787-13802.
- Taylor, G. I. (1938), Plastic strain in metals, *J. Inst. Metals*, 62, 307-324.
- Theunissen, K., et al. (1996), Mechanisms of inheritance of rift faulting in the western branch of the East African Rift, Tanzania, *Tectonics*, 15(4), 776-790.
- Tommasi, A., et al. (1999), Upper mantle tectonics: three-dimensional deformation, olivine crystallographic fabrics and seismic properties, *Earth and Planetary Science Letters*, 168(1-2), 173-186.

- Tommasi, A., et al. (2000), Viscoplastic self-consistent and equilibrium-based modeling of olivine lattice preferred orientations: Implications for the upper mantle seismic anisotropy, *Journal of Geophysical Research-Solid Earth*, 105(B4), 7893-7908.
- Tommasi, A., and A. Vauchez (2001), Continental rifting parallel to ancient collisional belts: an effect of the mechanical anisotropy of the lithospheric mantle, *Earth and Planetary Science Letters*, 185(1-2), 199-210.
- Tommasi, A., et al. (2004), Seismic anisotropy and compositionally induced velocity anomalies in the lithosphere above mantle plumes: a petrological and microstructural study of mantle xenoliths from French Polynesia, *Earth and Planetary Science Letters*, 227(3-4), 539-556.
- Tommasi, A., et al. (2008), Deformation, static recrystallization, and reactive melt transport in shallow subcontinental mantle xenoliths (Tok Cenozoic volcanic field, SE Siberia), *Earth and Planetary Science Letters*, 272(1-2), 65-77.
- Tucker, G. E. G. (1961), Texture and earing in deep drawing of Aluminium, *Acta Metallurgica*, 9(4), 275-286.
- Van Houtte, P., and A. Van Bael (2004), Convex plastic potentials of fourth and sixth rank for anisotropic materials, *International Journal of Plasticity*, 20(8-9), 1505-1524.
- Vauchez, A., et al. (1998), Rheological heterogeneity, mechanical anisotropy and deformation of the continental lithosphere, *Tectonophysics*, 296(1-2), 61-86.
- Vinnik, L., et al. (1994), Anisotropy in the center of the Inner-Core, *Geophysical Research Letters*, 21(16), 1671-1674.
- VonMises, R. (1913), Mechanik der festen Korper in plastisch-deformablen Zustand, Nachr Konigl Ges Wiss Gottingen, *Math Phys*, 582-592.
- Walker, K. T., et al. (2004), On the relationship between extension and anisotropy: Constraints from shear wave splitting across the East African Plateau, *Journal of Geophysical Research-Solid Earth*, 109(B8).
- Wenk, H. R., et al. (1991), Modeling plastic-deformation of peridotite with self-consistent theory, *Journal of Geophysical Research-Solid Earth and Planets*, 96(B5), 8337-8349.
- Wustefeld, A., et al. (2008), SplitLab: A shear-wave splitting environment in Matlab, *Comput. Geosci.*, 34(5), 515-528.
- Zhang, S. Q., and S. Karato (1995), Lattice preferred orientation of olivine aggregates deformed in simple shear, *Nature*, 375(6534), 774-777.
- Zhao, Z., et al. (2001), Introduction of a texture component crystal plasticity finite element method for anisotropy simulations, *Adv. Eng. Mater.*, 3(12), 984-990.

Table Index

Slip Systems	CRSS	Stress exponent
(010)[100]	1	3
(001)[100]	1	3
(010)[001]	2	3
(100)[001]	3	3
{011}[100]	4	3
{111}[110]	50	3
{111}[011]	50	3

Table 1: Olivine slip systems and associated critical resolved shear stresses and stress exponent used in VPSC calculations

	XX	YY	ZZ	XY	YZ	ZX
Loose strategy	-0,9946	0,4977	0,4969	0,0000	-0,0001	0,0011
Strong strategy	-0,9948	0,4983	0,4965	0,0000	-0,0006	0,0025
Uncoupled	-1,0000	0,5007	0,4993	0,0000	0,0000	0,0000

Table 2: Averaged normalized strain rate components after 60% of X compression for the two FEM coupling strategies. Comparison with the traditional VPSC approach

Figure index

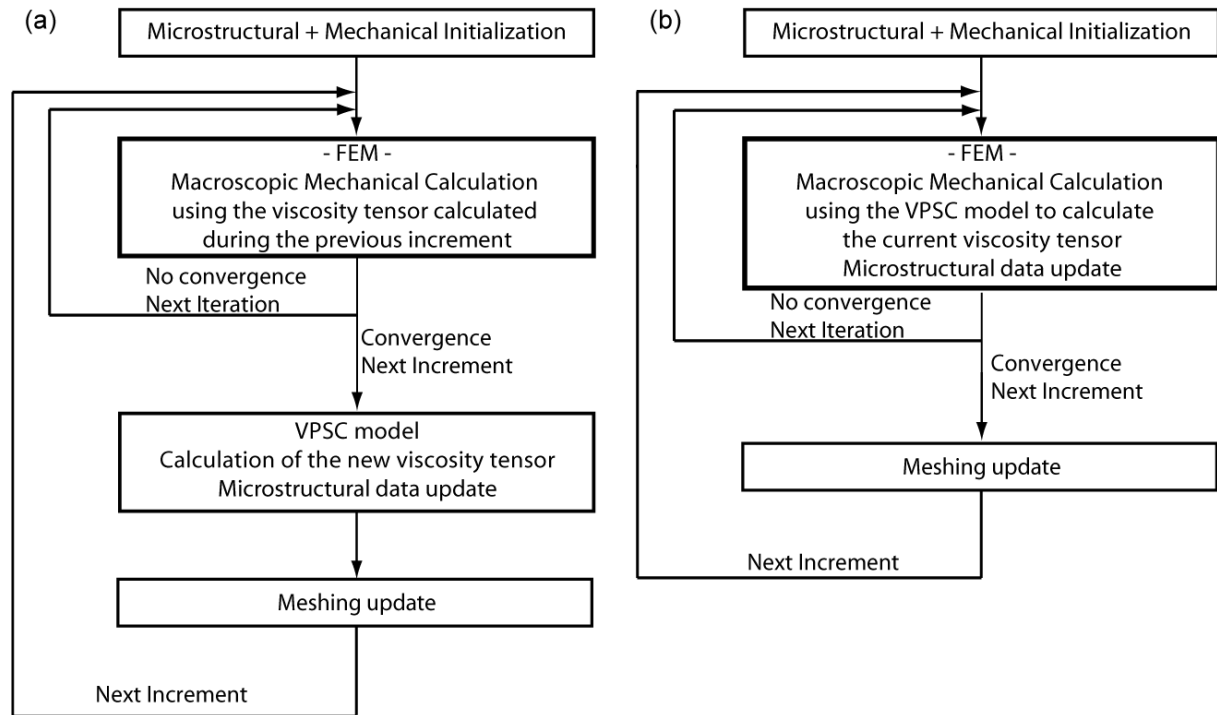


Figure 1: a) Loose coupling strategy, the VPSC formalism is called 1 time per increment, b) Strong coupling strategy, the VPSC formalism is called n times per increment with n the number of iterations necessary to achieve convergence of FEM iterative procedure

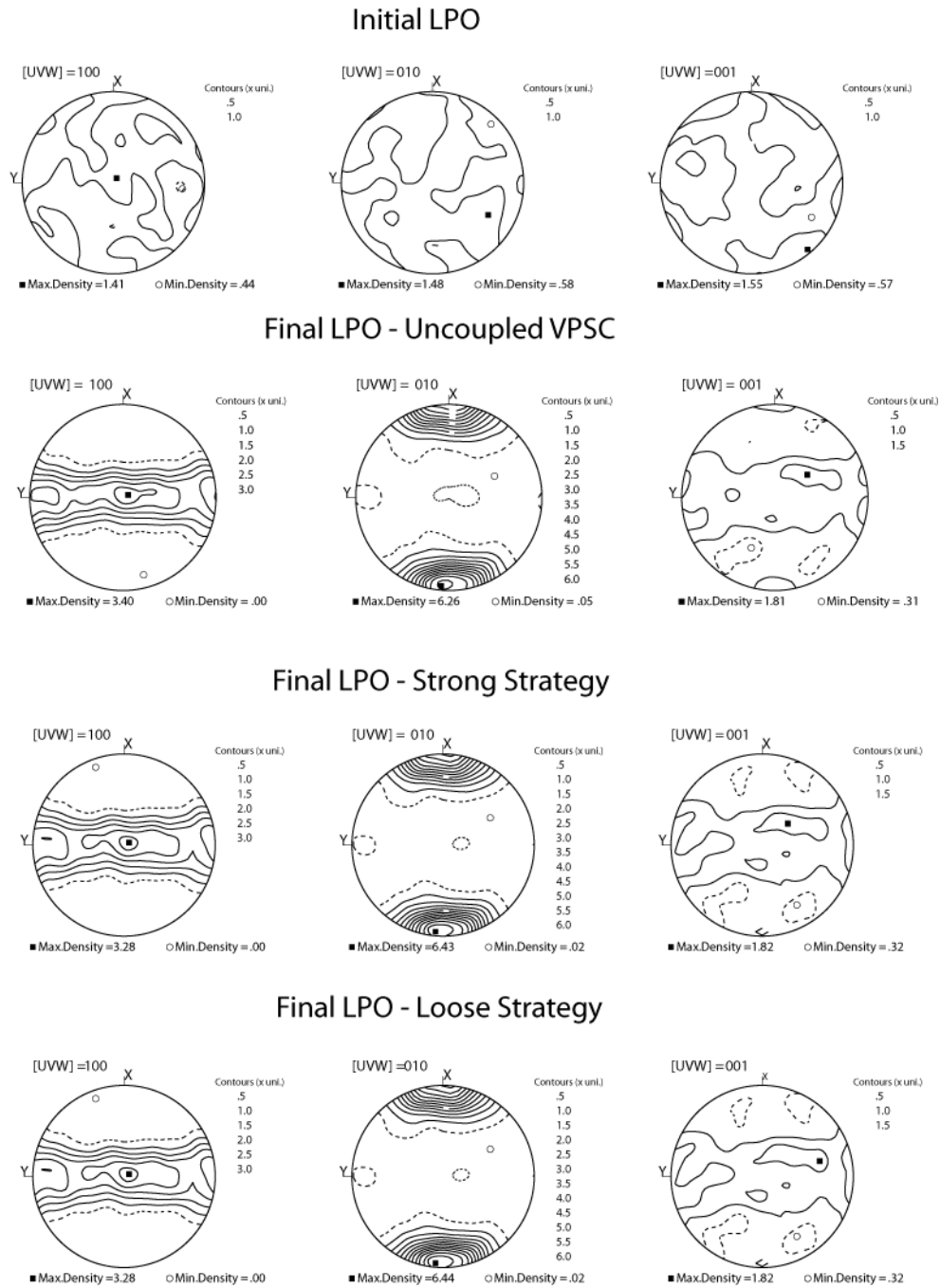


Figure 2 – Global initial and final CPO after 60% compression, comparison between uncoupled VPSC, strong and loose coupling strategies

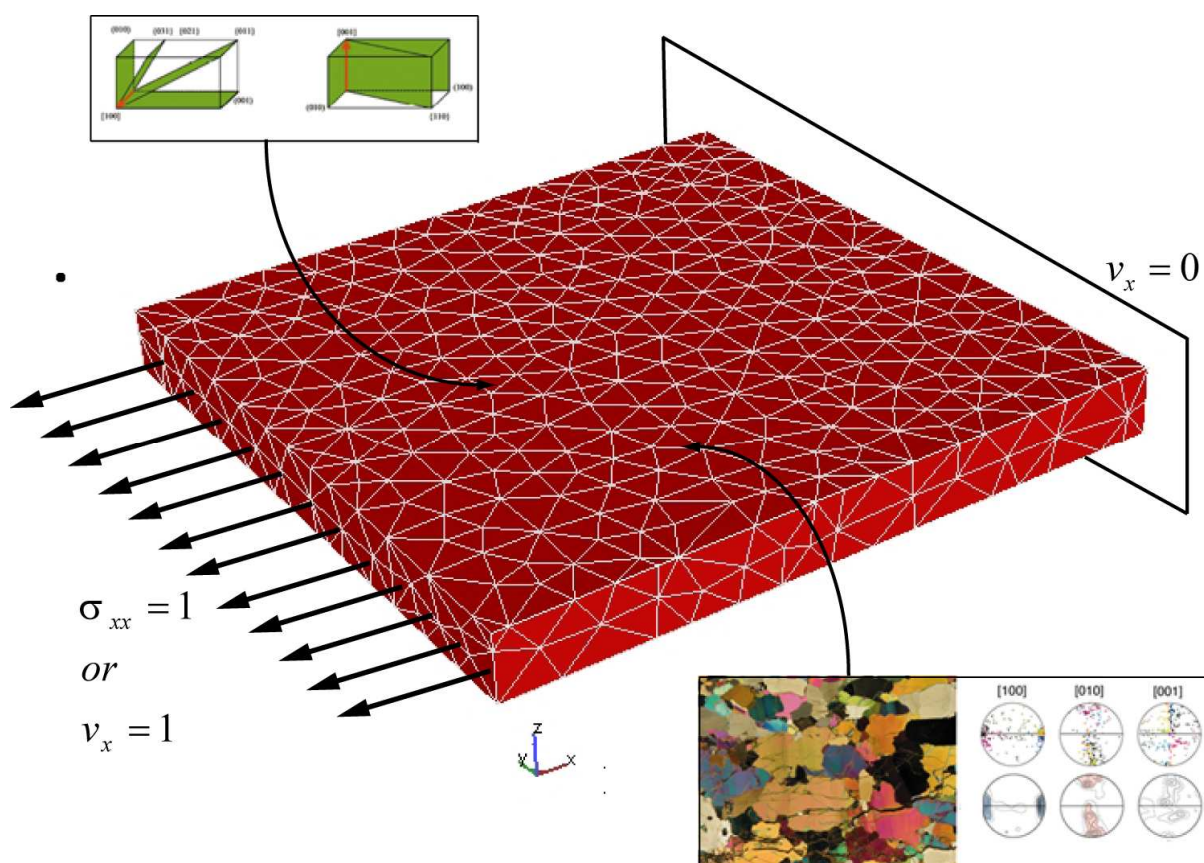


Figure 3 – Initial mesh and boundary conditions for the homogeneous plate models

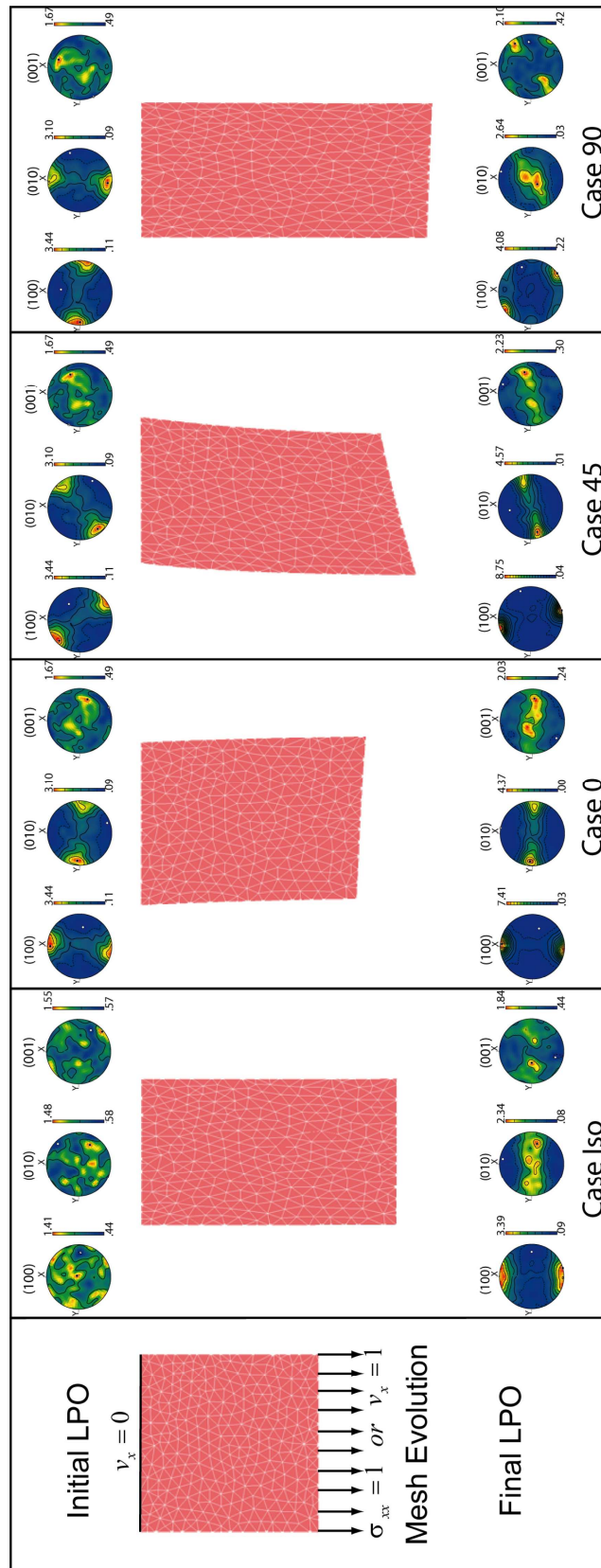


Figure 4 – Macroscopic deformation and evolution of olivine CPO for models where a homogeneous plate (100% olivine) with different initial CPO submitted to a constant extensional stress field during a normalized time of 1

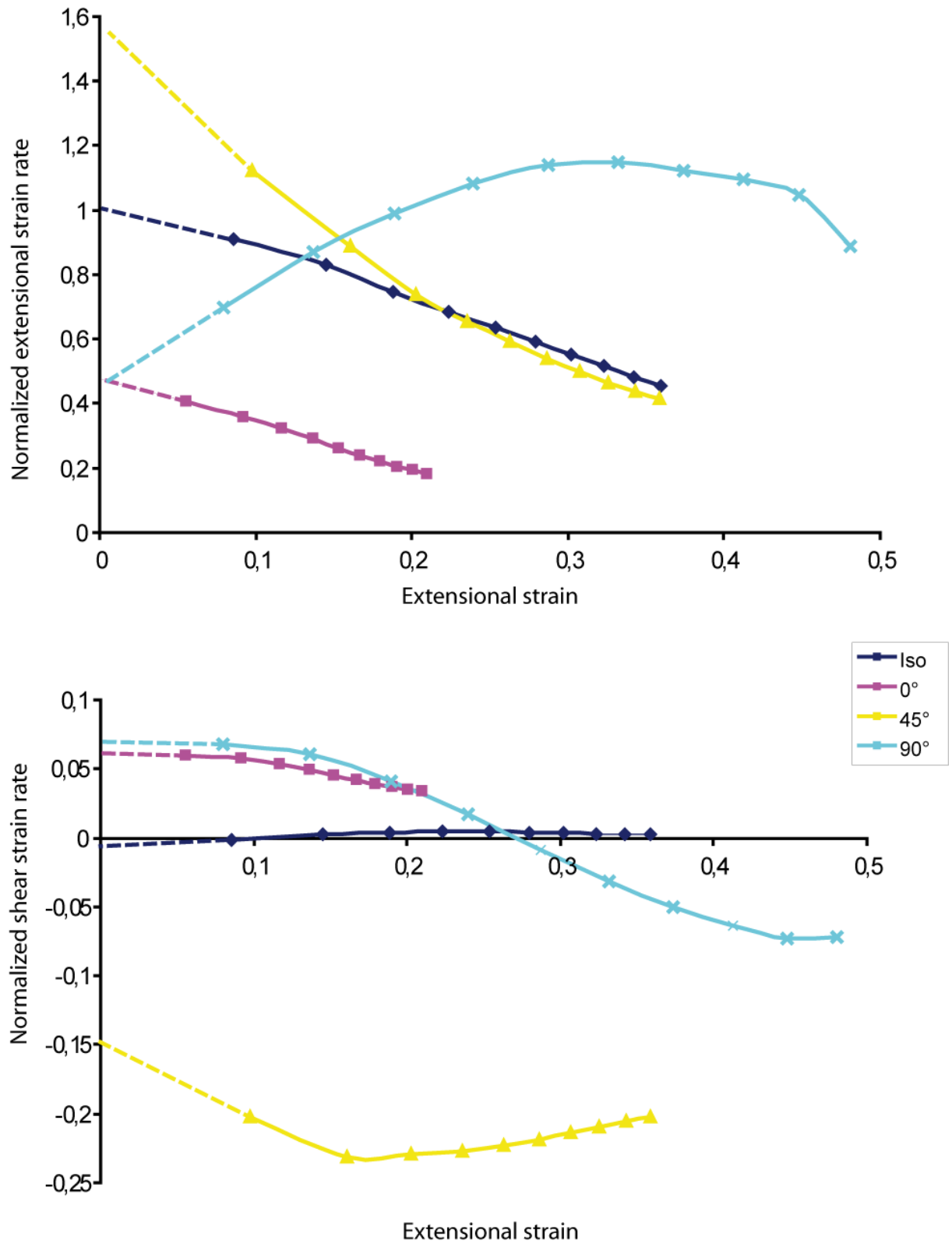


Figure 5 – Evolution of the normalized extension and XY shear strain rates as a function of the macroscopic finite extension along X for Iso, 0°, 45°, and 90° cases submitted to a constant velocity gradient in the X direction during an adimensional time of 1. Values are plotted each ten computation step

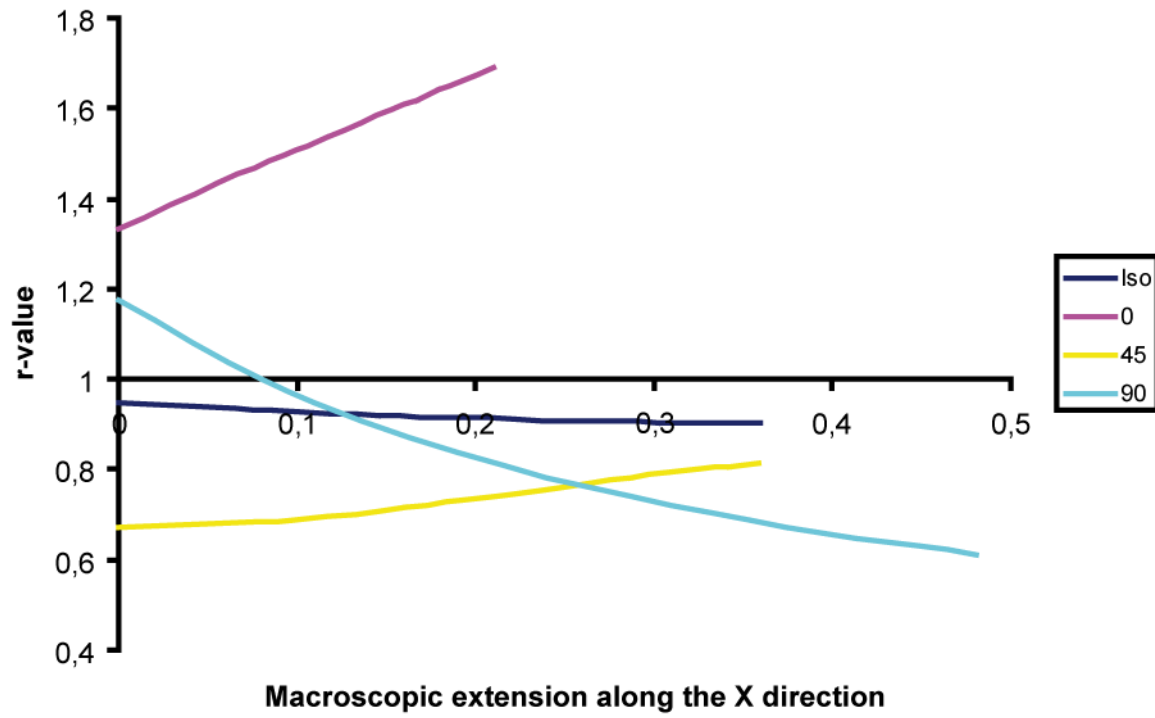


Figure 6 – Evolution of the r-value, $\dot{\epsilon}_{zz} / \dot{\epsilon}_{yy}$ for the Iso, 0°, 45° and 90° cases submitted to a constant extensional stress field during an normalized time of 1.

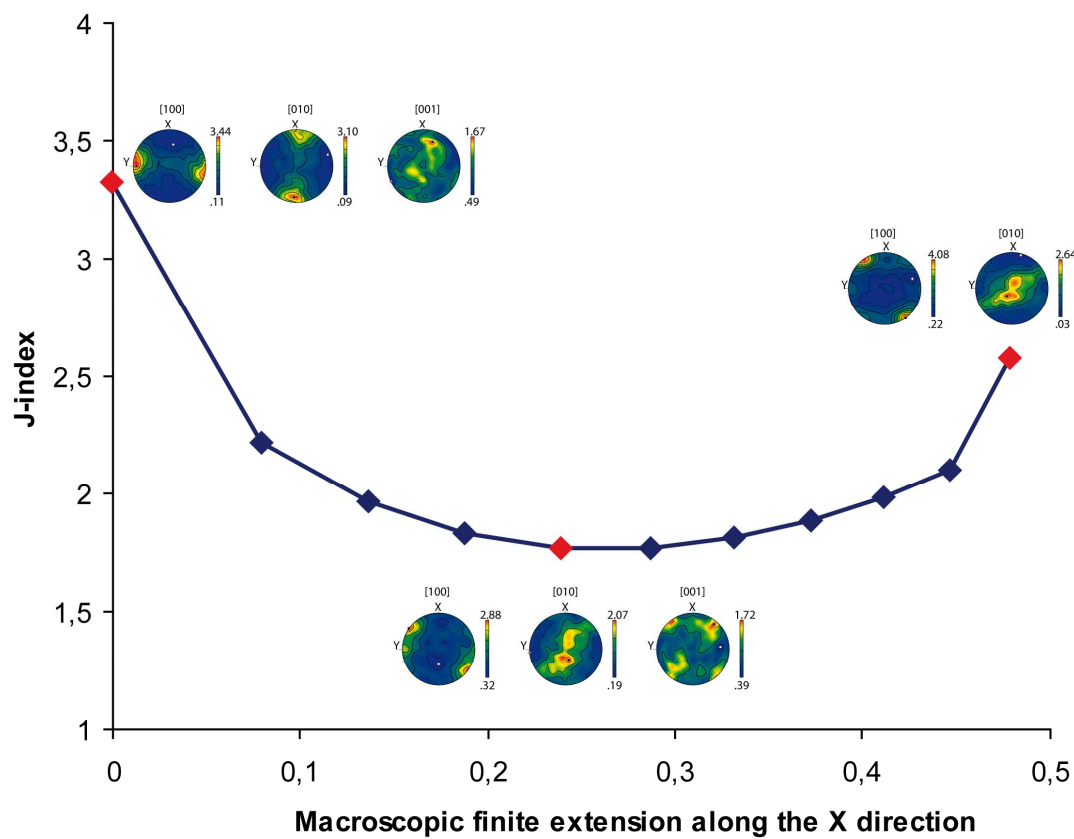


Figure 7 – Textural evolution for the 90° case submitted to a constant extensional stress field during a normalized time of 1

Chapitre 5 :

Multiscale modeling of the effect of preexisting lithospheric-scale wrench faults on the deformation of continental plates

Ce chapitre correspond à l'article *Knoll et al. 2009* en préparation pour soumission à la revue *Geochemistry, Geophysics, and Geosystems (G3)*.

Multiscale modeling of the effect of preexisting lithospheric-scale wrench faults on the deformation of continental plates*

Mickaël Knoll

Géosciences Montpellier, Université de Montpellier 2 & CNRS, Place E. Bataillon, cc. 060, 34095 Montpellier cedex 5, France (knoll@gm.univ-montp2.fr)

MINES ParisTech, CEMEF – Center for Materials Forming, BP207, 06904 Sophia Antipolis Cedex, France (mickael.knoll@mines-paristech.fr)

Andréa Tommasi

Géosciences Montpellier, Université de Montpellier 2 & CNRS, Place E. Bataillon, cc. 060, 34095 Montpellier cedex 5, France (andrea.tommasi@gm.univ-montp2.fr)

Roland E. Logé

MINES ParisTech, CEMEF – Center for Materials Forming, BP207, 06904 Sophia Antipolis Cedex, France (roland.loge@mines-paristech.fr)

Javier W. Signorelli

IFIR-CONICET, Universidad Nacional de Rosario, Bvd. 27 de Febrero 210bis, 2000 Rosario, Argentina (signorel@ifir-conicet.gov.ar)

Abstract

Recent multi-scale numerical models suggest that the preferred orientation of olivine crystals in the upper mantle induces a significant mechanical anisotropy in the lithospheric mantle that influences its deformation, producing strain localization, hardening, and modifying its deformation regime [Knoll *et al.*, 2009]. Analysis of seismic anisotropy data shows that olivine CPO in continental plates are rarely homogeneous, but that the lithospheric mantle often displays coherent CPO over large zones, especially along ancient transpressional orogenic belts or large-scale wrench faults. To understand the effect of these inherited structures on lithospheric plate flow, we developed a multiscale approach that explicitly takes into account an anisotropic viscosity due to the olivine CPO in the mantle by coupling a 3D Finite Element code to a self consistent polycrystalline rheological model. We calculate the mechanical behavior of a continental lithosphere containing a preexisting lithospheric-scale strike-slip shear zone submitted to extension. We tested the effect of the orientation of the preexisting fault relatively to the imposed extension direction, of the intensity of the olivine CPO within the shear zone, and the initial olivine CPO in the surrounding domains. Results of

* article in preparation for submission to G3

these multi-domain models show that reactivation of preexisting lithospheric scale shear zones depends essentially on orientation of the preexisting fault and on a lesser extent on the other parameters. Strain localization in the inherited structures is observed when the preexisting faults are oblique to the imposed extension. Deformation in an inherited shear zone at 45° to the imposed extension is characterized by shearing parallel to the fault trend, extension normal to it and vertical thinning, i.e., transtension. Evolution of the olivine CPO within and outside the shear zone leads to homogenization of the strain distribution and to decrease of the shearing component within the reactivated shear zone. Inherited fault zones normal to the imposed extension are initially stronger than the surrounding medium, but evolution of the olivine CPO with increasing strain leads to an inversion of the strength contrast and strain localization within the preexisting fault. Based on these results, we propose that viscoplastic anisotropy resulting from frozen olivine CPO in the lithospheric mantle is an important feature of plate tectonics, controlling the initiation of rifting or the location of intraplate seismicity and magmatism.

1. Introduction

The reactivation of geological structures is a major feature of continental deformation. However, most studies focus on the reactivation of brittle faults, a process commonly observed during basin inversion [Beacom *et al.*, 2000]. Recently Butler and co-workers [Butler *et al.*, 2008] extended this hypothesis by suggesting that the structural fabric of crustal mylonites, which are often characterized by a compositional layering, may result in a directional weakening and hence guide the deformation in the continental crust. However these processes cannot explain structural reactivation at the plate tectonics scale.

Major rift systems, for instance, tend to form parallel to ancient orogenic belts [Vauchez *et al.*, 1997]. Since the early work of Wilson [Wilson, 1966] on the North Atlantic system, reactivation of preexisting structures has indeed been proposed to control the location, the initial stages of deformation and the structuration of numerous rift systems such as the East African rift [Ring, 1994], the Rio Grande rift [Olsen *et al.*, 1987; Wilson *et al.*, 2005], the south Atlantic rift [Chang *et al.*, 1992], and the Baikal rifts [Chemenda *et al.*, 2002]. On a smaller scale, structural control by preexisting structures has also been proposed to control the formation of the Algarve rift in southern Portugal [Martins *et al.*, 2008] and of the Limagne and Roanne cenozoic grabens in the French Massif Central [Babuska *et al.*, 2002], as well as

of extensional faults systems in Thailand [Morley *et al.*, 2004] and in Indochina [Morley, 2007].

Reactivation of preexisting zones of weakness within continental plates has also been proposed to control the location of intraplate seismicity and alkaline magmatism [Sykes, 1978]. The New Madrid seismic zone in the southeastern United States, for instance, closely follows the orientation of a Neoproterozoic failed rift [Grana and Richardson, 1996]. Localized intraplate seismicity is also observed along major Hercynian faults in western Europe, such as the South Armorican shear zone in Brittany and the Sillon Houllier in the French Massif Central [Mazabraud *et al.*, 2005] or along Pan-African shear zones on the NE Brazil and Africa conjugate margins [Bezerra and Vita-Finzi, 2000; Attah *et al.*, 2005].

Structural control of intraplate magmatism due to reactivation of lithospheric-scale faults is an alternative mechanism to produce linear intraplate volcanic arrays. Based on spatial and temporal correlations with deformation in the western US, Tikoff *et al.* [Tikoff *et al.*, 2008], for instance, recently proposed that the Yellowstone and Columbia River basalt magmatism results from transtensional reactivation of the western Idaho shear zone rather than from a mantle plume. The lithosphere fabric was also proposed to have controlled the major precambrian magmatic events in South Africa, like the location of the Great Zimbabwe Dyke and of the Bushveld complex [Silver *et al.*, 2004]. In addition, in the same region, observed alignment of kimberlites tends to show that alkaline volcanism is linked to lithospheric stress distribution [Moore *et al.*, 2008].

This systematic reactivation of ancient lithospheric structures suggests that the preexisting structure of the lithosphere influences numerous geological systems. Olivine, which is the dominant constituent of the upper mantle, deforms mainly by dislocation creep. This mode of deformation is highly dependent on the crystallographic structure, since dislocations move in discrete slip systems defined by a glide plane and a direction – the Burgers vector. In orthorhombic olivine few slip systems may be activated (Table 1). Moreover, the resistance to dislocation glide in these systems, expressed by their critical resolved shear stress (CRSS), is highly variable [Durham and Goetze, 1977; Bai *et al.*, 1991], leading to a highly anisotropic mechanical behavior. Thus if olivine crystal preferred orientation (CPO) are coherent over large scales in the upper mantle, the latter should also display an anisotropic mechanical behavior.

Based on the parallelism between fast polarization directions of teleseismic shear waves in ancient collisional belts and normal faults in rifts and continental margin, *Vaucher et al.* [Vaucher et al., 1997] proposed indeed that olivine CPO developed during past tectonic events and frozen in the lithospheric mantle since then results in an anisotropic mechanical behavior of the lithosphere. *Tommasi and Vaucher* [Tommasi and Vaucher, 2001] used polycrystal plasticity models to test the effect of a CPO-induced mechanical anisotropy of the lithospheric mantle in the rifting process. They showed that a preferred orientation of olivine crystals in the lithospheric mantle induces an anisotropic deformation of the plate, characterized by a directional softening, which may result in strain localization in domains in which the preexisting tectonic fabric is oblique to the extensional stresses and produces shearing parallel to the preexisting structures. However, these models only indicate the initial tendency of the system, since they did not allow for the evolution of the CPO in response to new stress field.

To fully take into account the effect of an evolving anisotropic viscosity controlled by the orientation of olivine crystals in the upper mantle we developed a multi-scale modeling approach that couples a 3D finite element modeling of the mechanical behavior of a lithospheric plate to a polycrystal plasticity model that calculate the local viscosity tensor and crystal preferred orientations based on the single-crystal mechanical behavior and on the local deformation field [Knoll et al., 2009]. Models of the deformation of lithospheric plate containing a homogeneous olivine CPO submitted to extension show a highly anisotropic mechanical behavior, characterized by changes in both the strength of the plate and the deformation regime as a function of the evolving olivine CPO orientation relative to the imposed extension [Knoll et al., 2009].

In order to better understand the influence of a olivine CPO frozen in the lithospheric mantle on reactivation of preexisting geological structures, we use here this multi-scale numerical model to simulate the extensional deformation of a plate crosscut by a lithospheric-scale wrench fault. We analyse the influence of the orientation of the preexisting fault, the dependence of the anisotropy on the olivine CPO intensity, and the role of the olivine CPO in the surrounding lithosphere on the reactivation of the preexisting structures during a rifting episode.

2. Multiscale modeling of the deformation in an anisotropic upper mantle

As in [Knoll *et al.*, 2009] the deformation of an anisotropic lithospheric plate is modeled by a two-steps scale-transfer approach. The polycrystal mechanical behavior, characterized by an anisotropic viscosity tensor, is obtained from homogenization of individual representative grains behavior, described by single crystal plasticity, using a viscoplastic self-consistent (VPSC) approach [Molinari *et al.*, 1987; Lebensohn and Tome, 1993]. At the crystal scale, deformation is accommodated by dislocation glide only. The total strain rate in the crystal is the sum of the shear rates in all active slip systems, which are related to the local deviatoric stress tensor σ' by a non-linear viscous response:

$$\dot{\epsilon}_{ij} = \dot{\gamma}_0 \sum_{s=1}^{\#sys} m_{ij}^s \frac{m_{pq}^s \sigma'_{pq}}{\tau_c^s} \left| \frac{m_{pq}^s \sigma'_{pq}}{\tau_c^s} \right|^{n^s-1} \quad (1)$$

where $\dot{\gamma}_0$, $\tau_c^{(sys)}$, n^s and $m^{(sys)}$ are a reference strain rate, the critical resolved shear stress (CRSS), the inverse of the rate sensitivity and the Schmid tensor of the slip system s , respectively. The VPSC model imposes both strain compatibility and stress continuity between grains and their environment, which is represented by a Homogeneous Equivalent Medium (HEM), which have the homogenized, calculated properties of the polycrystal. The grain mechanical behavior is thus linked to the polycrystal mechanical behavior through:

$$\dot{\epsilon}_k - \dot{E}_k = -\tilde{M}_{kl} (\sigma'_l - \Sigma'_l) \quad (2)$$

where the microscopic strain rate tensor and stress tensor for each grain $(\dot{\epsilon}, \sigma')$ and the equivalent macroscopic quantities (\dot{E}, Σ') are linked by an interaction tensor \tilde{M} of 4th order. The VPSC approach allows therefore calculating for a given olivine CPO and an imposed deformation field both the texture evolution and the full anisotropic macroscopic viscosity tensor. To maintain reasonable computation times and for simplicity as a first approach, recrystallisation or grain growth are not considered in the present models.

The second step of the scale-transfer consists in determining the effect of the local CPO-induced anisotropy on the large-scale stress and strain field. To perform this step, the VPSC

formalism is coupled to FORGE2005[®], a commercial 3D FEM code specialized in materials forming [Mocellin *et al.*, 2001]. This software uses a Lagrangian updated scheme, based on a weak formulation of the classical equations of mechanical equilibrium in terms of displacement rate/pressure evolution. FORGE2005[®] uses enhanced tetrahedral finite elements P1+/P1, i.e. composed of four nodes with a linear interpolation in displacement rate and pressure. An additional 5th node placed at the centre of the element improves the interpolation of the velocity field. Constitutive equations are resolved by an iterative Newton-Raphson procedure where the velocity and the pressure are the incremental unknown factors.

The coupling between the homogenization formalism and the FEM formulation is performed through a finite set of crystallographic orientations, representative of the CPO, associated to the integration point of each element of the mesh. At each time increment, the calculated displacement rate (velocity) gradient tensor in the FEM is used as the boundary condition for the VPSC simulation, leading to CPO evolution and anisotropic rheology. The viscosity tensor η_{ijkl} obtained from the VPSC and the local macroscopic strain rate tensor \dot{E}_{kl} are then used to calculate the new stress field Σ_{ij} in the FEM:

$$\Sigma_{ij} = \eta_{ijkl} \dot{E}_{kl} \quad (3)$$

In the present models, we use a loose coupling strategy, where the polycrystal calculation is run only at the end of the FEM time increment. In this case, the Newton-Raphson procedure uses the viscosity tensor calculated from the converged velocity gradient field at the previous time step to estimate the stresses. This strategy is significantly faster than the strong coupling one, where the VPSC is run after each Newton-Raphson iteration. Careful comparison of textures and mechanical results for olivine polycrystals predicted using both strategies shows that the differences between them are < 1% [Knoll *et al.* 2009].

To define regions displaying different initial CPO, we use a multi-domain mesh tools based on level set functions [Bernacki *et al.*, 2008]. The plate is initially meshed isotropically. Then the interfaces between the different zones are refined using an iterative procedure, while a coarser mesh is prescribed at the heart of each zone, which should display a homogeneous mechanical behavior due to the initially homogeneous CPO. This method allows a fine

description of the interfaces with a minimum number of mesh elements, allowing for reasonable computation times.

Based on deformation experiments on olivine single crystals and aggregates, as well as transmission electron microscopy observations on naturally and experimentally deformed peridotites [Raleigh, 1968; Phakey *et al.*, 1972; Goetze and Kohlstedt, 1973; Durham and Goetze, 1977; Durham *et al.*, 1977; Darot and Gueguen, 1981; Doukhan *et al.*, 1984; Mackwell *et al.*, 1985; Bai *et al.*, 1991; Bai and Kohlstedt, 1992; Couvy *et al.*, 2004; Mainprice *et al.*, 2005; Jung *et al.*, 2006; Raterron *et al.*, 2007], we propose that deformation in the lithospheric mantle is essentially accommodated by dislocation glide on $\{0kl\}[100]$ systems. Observations in peridotite massifs suggest that low temperature and high deviatoric stresses may result in activation of $[001]$ systems in the lithospheric mantle, but that this is limited in metric to cm-scale fine-grained shear zones where a large part of the deformation is accommodated by grain boundary sliding or diffusional processes [Vissers *et al.*, 1997]. Indeed olivine CPO most commonly measured in peridotite xenoliths and massifs that sample the upper 200 km of the mantle are well reproduced by polycrystal plasticity simulations that use CRSS derived from high-temperature, low-stress deformation experiments on olivine single crystals [Wenk *et al.*, 1991; Tommasi *et al.*, 2000]. These CRSS values (Table 1) are therefore used in the present simulations.

3. Models geometry and initial conditions

All models were run using a plate of $1 \times 1 \times 0.1$ (non-dimensional units) submitted to a constant divergent velocity parallel to X at the left boundary (YZ plane at $x=0$, Figure 1). Free slip conditions (null tangential stresses) are applied to the opposed boundary (YZ plane at $x=1$), except at a node at its centre that is fixed in all three directions to avoid translation of the plate. All remaining boundaries are free (normal and tangential stresses are null). A polycrystal composed of 1000 initially spherical olivine crystals is associated to each element of the FEM.

In the inherited zone, we consider for the reference case an orthorhombic CPO characterized by clear orthogonal maxima of $[100]$ and $[010]$, which is oriented with the maximum concentration of $[100]$ at 45° to the extension direction, i.e. aligned parallel to the inherited zone. The maximum concentration of $[001]$ axes is vertical. This choice of initial CPO intends

to simulate the mantle fabric in an inherited lithospheric-scale vertical strike-slip or transpressional shear zone [Tommasi *et al.*, 1999]. It is coherent with the polarization of fast SKS waves parallel to the fault trend and large delay times (≥ 1.5 s) observed above major active and fossil wrench faults, like the Kulun and Altyn Tagh in Tibet, the Great Glen fault in Scotland, the neoproterozoic shear zones in southeast Brazil or the great Slave shear zone in Canada [Helffrich, 1995; Herquel *et al.*, 1999; Vauchez and Tommasi, 2001; Wu *et al.*, 2002; Heintz *et al.*, 2003] or above transform boundaries, like the Alpine fault in New Zealand [Duclos *et al.*, 2005].

It should be stressed that the present models are the first step of a long-range study on the reactivation of lithospheric structures during continental deformation. They focus on the effect of a CPO-induced anisotropic ductile deformation in the lithospheric mantle, described macroscopically by an evolving anisotropic viscosity and do not consider elastic, thermal or recrystallization/grain growth effects. Critical resolved shear stresses are constant and the crystal and the polycrystal mechanical behaviors only depend on the crystallographic orientation and on the deviatoric stresses. The compositional and rheological stratification of a real continental plate are also not simulated. The modeled plate is composed of 100% olivine, representing the lithospheric mantle. The use of a more realistic composition, including other upper mantle phases, like pyroxenes, should not significantly change the results, since olivine is the weakest and most abundant phase in the upper mantle and accommodates therefore most of the deformation.

4. Model results: reactivation of a preexisting wrench fault at 45° to the imposed extension

The effect of the mechanical anisotropy induced by the different initial CPO is investigated by analyzing the evolution of the CPO, the slip systems activity, and of the strain rate tensor with increasing deformation within and outside the preexisting shear zone in the different models. The reference case contains a preexisting shear zone at 45° to the extension direction surrounded by a quasi-isotropic medium, characterized by a random olivine CPO. Strain localization is characterized by comparing the Von Mises equivalent strain rates in the inherited fault and in the surrounding medium normalized by the equivalent strain rate in a medium with a random olivine CPO, that is, the equivalent strain rate in the surrounding

medium at the start of the simulation, $\dot{\epsilon}_{eq}^0 = \sqrt{\frac{2}{3}(\dot{\epsilon}_{ij}^0 \dot{\epsilon}_{ij}^0)}$. To define the deformation regime, we analyze the different components of the strain rate tensor using the same normalization scheme. However, the components of the strain rate tensor in the surrounding medium are plotted in the macroscopic reference frame XYZ, whereas within the inherited shear zone, they are plotted in the shear zone reference frame X'Y'Z' (Figure 1).

In both the inherited shear zone and the surrounding mantle, deformation is mainly accommodated by activation of the (001)[100] and (010)[100] slip systems. Within the inherited zone, the CPO strengthens and rotates progressively in order to align the [100] axes parallel to the imposed extension and the [010] and [001] respectively to the Y and the Z directions (Figure 2). This rotation is nevertheless slow; after a total extension imposed to the model of 35%, the [100] maximum is still at 30° anticlockwise from the imposed extension direction (X). In the surrounding domain, increasing strain also leads to development of a CPO characterized by alignment of the [100] axis parallel to the X direction while [010] and [001] tend to align in the Y and the Z directions respectively, but since strain rates are lower the final CPO is more dispersed than the one within the inherited shear zone.

Analysis of the evolution of the normalized Von Mises equivalent strain rate with increasing extensional strain within the inherited shear zone and in the surroundings (Figure 3) shows (i) initially higher strain rates in the inherited shear zone, indicating strain localization within it; (ii) a progressive decrease of the Von Mises equivalent strain rates in both the inherited shear zone and in the surroundings, indicating that the evolution of CPO leads to hardening; (iii) this hardening is faster in the inherited shear zone, leading, at total extensional strains > 0.3 to a homogeneous strain distribution in the model. However, a closer analysis of the different components of the strain rate tensor (Figure 3) shows different strain accommodation modes or deformation regimes in the two zones during the entire model evolution. The inherited shear zone is characterized by sinistral (anti-clockwise) shearing parallel to the preexisting structure trend ($\dot{\epsilon}_{x'y'}$) associated with stretching normal to it ($\dot{\epsilon}_{x'x'}$) and vertical thinning ($\dot{\epsilon}_{zz}$). The horizontal shearing rate declines faster with increasing finite strain (imposed extension) than the stretching and thinning rates, suggesting a stronger effect of the CPO evolution (rotation of [100] towards the imposed extension direction) on this strain rate

component. The surroundings deform by axial extension, where the stretching in the X direction is compensated by shortening in the Y direction and thinning in the Z direction.

Analysis of the strain distribution indicates that lateral variations in olivine CPO within a plate may result in reactivation of the preexisting shear zone even in presence of weak olivine CPO. In fact, in the present model, the intensity of the CPO (that can be characterized by the J index that is the integral of the orientation distribution function [Bunge, 1982] in the inherited structure is rather weak (J index of 3) relatively to those CPO typical for naturally deformed mantle rocks that have J indexes clustering between 6 and 12 [Tommasi *et al.*, 2000]. The evolution of the equivalent strain rates and of the deformation regime in the inherited shear zone suggests that both depend strongly on the orientation of the olivine CPO. Higher strain rates lead to a faster evolution of the CPO intensity within the inherited zone compared to the surrounding domain. In consequence, the strain localization in the inherited structure declines and a homogeneous equivalent strain rate distribution is observed after an imposed total stretching of 30%. However, higher thinning rates are observed in the inherited shear zone during the entire run (Figure 3). This indicates that the homogeneity of the equivalent strain rates at large finite extension does not imply a homogeneous deformation within the model, since the two domains are submitted to different deformation regimes.

In the following sections, we analyze the influence of the intensity of the initial olivine CPO, of the existence of an initially non-random olivine CPO in the surroundings, and of the orientation of the preexisting fault respectively to the imposed extension direction on the plate deformation.

5. Influence of the intensity (strength) of the initial olivine CPO

To investigate the effect of initial CPO intensity on the deformation process, we compare our reference case, presented in the previous section, to the results of models with the same geometry, but with stronger initial olivine CPO within the inherited shear zone. Two olivine CPO with the same symmetry and orientation, but stronger concentrations, expressed by J-indexes of 4 and 6, are tested.

Stronger initial olivine CPO results in an initially higher strain localization in the inherited shear zone: a CPO with a J index of 6 leads to equivalent strain rates that are initially 1.5

times higher than those in the surrounding plate, whereas a CPO with a J index of 3 leads to strain rates 1.2 times higher (Figure 4). However stronger initial CPO also results in faster hardening. Homogeneous strain rates are observed in all models at ca. 30% of total stretching in the X direction and, for larger finite strains, models with strong initial CPO in the inherited shear zone show higher strain rates in the surroundings relatively to the inherited shear zone. The same tendency is seen by analyzing the evolution of total stretching and horizontal shearing rate (Figure 4).

The intensity of the initial CPO in the inherited structure also influences the distribution of vertical thinning in the models. Strong initial olivine CPO in the inherited shear zone leads to higher strain localization, expressed as higher vertical thinning rates in the inherited shear zones and lower thinning rates in the surroundings relative to models with weaker initial CPO (Figure 5). In both domains, evolution of the CPO with increasing finite stretching causes a decline of the thinning rates, but this decrease is more marked for strong initial CPO. However, even in the model with the strongest initial olivine CPO in the inherited domain (J=6) vertical thinning remains localized in the inherited shear zone up to total finite stretching of 35%.

A stronger initial CPO in the inherited fault therefore favors its reactivation. It results in higher XY shearing and vertical thinning rates in the initial stages of the model evolution. The

ratio $\left| \frac{\dot{\epsilon}_{x'y'}}{\dot{\epsilon}_{x'x'}} \right|$, that characterizes the vorticity, is proportional to the initial CPO strength, varying

from 4 for a CPO with a J-index of 3 to 6 for an initial CPO with a J index of 6. However, stronger initial CPO results in faster geometrical hardening and the mechanical contrast as well as the vorticity tend to decrease for large imposed deformations (total stretching > 30% in the present model). Indeed, in all three models, the vorticity tends to the same value of 2 for total extensional strains > 30%.

6. Influence of the initial CPO in the surrounding domain

The effect of the surrounding domain CPO on inherited shear zone reactivation is investigated by replacing the initially random CPO of the surrounding medium by a CPO similar to the

one in the inherited shear zone (same symmetry and intensity, J index = 3), but with a different orientation. Three different orientations are tested. The first has a maximum concentration of [100] axes parallel to the imposed extension direction. The second has the maximum concentration of [100] axes normal to it. In both cases, the maximum concentration of [001] axes is vertical. The third orientation is characterized by a maximum concentration of [100] axes aligned parallel to the trend of the inherited zone, as in the inherited zone, but the [010] axes are vertical.

Analysis of the evolution of the strain rates in the first case shows that the contrast in mechanical behavior between an inherited shear zone at 45° to the imposed extension and its surroundings when the latter have an initial CPO with the [100] maximum parallel to it is more marked than the one observed in the reference model. Von Mises equivalent strain rates within the inherited shear zone are initially 1.5 times higher than in the surroundings (Figure 6). Moreover, in contrast to the reference model, the evolution of the CPO in both domains reinforces the strain localization; after a total finite stretching of 40% imposed to the model, equivalent strain rates within the inherited domain are twice those outside. This strain localization also leads to a faster thinning within the inherited shear zone. The surrounding domain deforms roughly by axial extension, but thinning ($\dot{\epsilon}_{zz}$) rates are slightly higher than shortening ones ($\dot{\epsilon}_{yy}$). The inherited shear-zone, as in the reference model, deforms by transtension, but the horizontal shearing rate $\dot{\epsilon}_{x'y'}$ tends to increase with increasing finite strain. This effect is the results of the increasing of the geometrical hardening of the surrounding domain during the extension (Figure 6).

Clear strain localization within the inherited shear zone (Von Mises equivalent strain rates are >1.5 times higher than those in the surroundings, Figure 7) is also observed during the initial stages of evolution of the model where the olivine CPO in the surrounding medium has the maximum concentration of [100] normal to the imposed extension. However, the evolution of this model is very different from the one in the preceding case. The Von Mises equivalent strain rate in the inherited shear zone quickly decreases, while those in the surrounding medium remain almost constant. For total finite extensions $> 15\%$, higher equivalent strain rates are thus observed in the surrounding medium. Analysis of the evolution of the strain rates show as in the previous model a transtensional reactivation of the shear zone at the initial stages of extension, characterized by a ratio between horizontal shearing and stretching

rates $\left| \frac{\dot{\epsilon}_{x'y'}}{\dot{\epsilon}_{x'x'}} \right|$ of 3. However the shear strain rate, originally developed parallel to the inherited shear zone, strongly decreases with increasing finite extension, whereas the horizontal stretching rates remain almost constant, leading to a decrease in the vorticity. Vertical thinning rates within the band also decrease and the localization disappears after 15% of extension. This evolution in strain rates and deformation regime within the inherited shear zone is a direct result of the evolution CPO of the surrounding domain. As shown in [Knoll *et al.*, 2009], a plate with an initial olivine CPO as the one in the surrounding domain submitted to an extension normal to the maximum concentration of [100] responds by a fast rotation of the CPO, which results in a marked weakening of the plate. The coupled evolution of the CPO in the inherited shear zone and in surrounding medium leads therefore to hardening of the first and weakening of the later, explaining the evolution of the strain distribution in the present model (Figure 7).

Finally, an analysis of the strain rates evolution for the model in which the initial olivine CPO in both the inherited shear zone and the surrounding medium has the maximum concentration of [100] axes horizontal at 45° of the extension direction, but where the position of [010] and [001] axes are inversed: the [001] maximum is vertical in the inherited shear zone and horizontal outside, shows an initially weak, but continuously increasing strain localization, due to increasing hardening of the surrounding medium with increasing finite strain (Figure 8). The ratio between the Von Mises equivalent strain rates in the inherited shear zone and the surroundings increases from 1.1 to 1.5. The inherited shear zone deforms by transtension with roughly constant stretching $\dot{\epsilon}_{xx}$ and horizontal shearing strain $\dot{\epsilon}_{xy}$ rates resulting in a quasi-

constant vorticity ratio $\left| \frac{\dot{\epsilon}_{xy}}{\dot{\epsilon}_{xx}} \right|$ of 3.

7. Influence of the orientation of the inherited shear zone relatively to the solicitation

To test the influence of the orientation of the inherited shear zone relatively to the imposed extension on its reactivation, we run, in addition to the reference case, where the inherited shear zone is at 45° to the imposed extension, models where it is either parallel or normal to the imposed extension. The surrounding medium has an initially random olivine CPO in all

cases. The inherited zone presents an initial CPO characterized by a J index of 3. The [100] and [010] axes maxima are horizontal parallel and normal to its trend, respectively, and the [001] axes maximum is vertical.

The case with an inherited shear zone parallel to the imposed extension direction is characterized by similar Von Mises equivalent strain rates in the inherited shear zone and the surroundings, which decrease continuously with increasing finite strain. The absence of strain localization in this model is essentially due to the fact that the kinematic boundary conditions are applied directly on both domains, imposing a similar stretching rate in them. The lateral variation in strength due to the change in olivine CPO is here better expressed as a difference in average deviatoric stresses that are 1.8 times higher in the inherited shear zone. However, even in this case, the lateral variation in initial CPO results in different deformation regimes: the surrounding domain accommodates the deformation by axial extension while the inherited zone deforms in transtension with a weak dextral shearing component that remains roughly constant during the entire simulation (Figure 9).

The case with an inherited shear zone normal to the imposed extension direction shows a more complex evolution. The inherited shear zone is initially slightly stronger than the surroundings (Figure 10). However the evolution of the CPO with increasing strain results in hardening outside the inherited shear zone due to the progressive orientation of the olivine [100] parallel to the extension direction, whereas the reorientation of the CPO results in weakening within the inherited shear zone. The different CPO evolution in the two domains result therefore in strain localization in the inherited shear zone for finite strains $\geq 15\%$. For lower strains, the surrounding domain deforms by axial extension, whereas horizontal stretching in the inherited domain is accompanied by weak anticlockwise horizontal shearing. However this shearing decreases in response to the reorientation of the CPO and an inversion of the shear sense is observed after 30% of extension.

8 Discussion

Continental plates are long-lived features formed by a succession of collision and rifting events, which is clearly recorded by lateral variation in crustal ages and fabric within a plate. However these tectonic events are not limited to the crust, they affect the entire lithosphere. Deformation in the lithospheric mantle results in development of olivine CPO, which can be

preserved for very long time spans. Indeed study of naturally deformed mantle rocks indicates that olivine CPO are not significantly changed by thermal or magmatic processes [Vauchez and Garrido, 2001; Tommasi *et al.*, 2004]. This observation is in good agreement with shear wave splitting data in continental plates showing fast polarization directions well correlated with the crustal fabric of the overlying collisional belts independently of their age [Helffrich, 1995; Herquel *et al.*, 1999; Vauchez and Tommasi, 2001; Wu *et al.*, 2002; Heintz *et al.*, 2003].

The present models highlight that this olivine CPO results in an anisotropic rheology in the lithospheric mantle. Changes in the orientation and intensity of the olivine CPO within the plate will result in variations in the plate strength, leading to strain localization. Analysis of the strain distribution in models containing a preexisting lithospheric-scale wrench fault with different orientations relative to the imposed extension confirm previous results [Tommasi and Vauchez, 2001] that proposed that CPO-induced viscoplastic anisotropy produces a directional softening leading to the reactivation of the preexisting shear zone in transtension when it is oblique to the imposed extension, whereas preexisting faults parallel or normal to the imposed extension display higher than average strengths. Two features characterize the reactivated zones: horizontal shearing, i.e., a strike-slip component of deformation, parallel to the trend of the preexisting fault and faster vertical thinning (Figs. 3-8). Progressive rotation of the olivine CPO towards the imposed extension direction results in decrease of the shearing and hardening. If no other strain localization process is activated (change in deformation mechanism due to grain refinement, shear heating, interactions between magma transport and deformation...), this hardening should result in strain delocalization and hence in a failed rift.

These predictions are in good agreement with the evolution of the deformation in many continental rifting systems. Transtension is often observed in the initial stages of rifting. The initial extension in the Southwest Indian ridge and in the Afars-East African rift system for instance reactivates preexisting structures of the Mozambique belt [Keranen and Klemperer, 2008]. Moreover, both rift systems underwent a significant component of motion parallel to the rift trend in their early stages. In the Southwest Indian Ocean, for instance, this early transtensional deformation is clearly evidenced by the length of active transform segments relative to the ridge segments [Lawyer, 1985]. The Red Sea opening also involved a large amount of strike-slip deformation, as did the western branch of the East African rift [Theunissen *et al.*, 1996], and, although the present-day extension in the eastern branch is

roughly normal to its trend, there is evidence for dextral transtension during the Miocene [Bosworth and Strecker, 1997].

Based on the analysis of the seismic, gravity, and geological data in the East African rift, Keranen and Klemperer [Keranen and Klemperer, 2008] propose that the progression of the deformation in the East African system from the Afars towards the south has been controlled by variations in the preexisting structure of the lithosphere. Both the rift orientation and the crust thickness vary along the trend of the rift; the southern domain that is oriented at $\sim 20^\circ$ to the present-day extension direction shows limited thinning, whereas the northern part that is at $\sim 50^\circ$ of the present-day extension direction is characterized by a thinner crust [Mickus *et al.*, 2007]. The observed variation in vertical thinning is coherent with the predictions from multiscale modeling that show more strain localization and faster thinning rates when the inherited structures are oblique to the imposed extension direction.

Reactivation of inherited structures is not limited to the initiation of continental rifts. CPO-induced viscoplastic anisotropy associated with lithospheric scale wrench faults may also explain the long-lived nature of some faults, which are systematically reactivated during successive collisional and extensional episodes. An example is the Newfoundland-Azores-Gibraltar Fault zone. During the Hercynian orogeny, this fault acted as a dextral strike-slip boundary [Keppie, 1989]. Shear wave splitting data in the eastern North America show E-W fast polarization directions, parallel the trend of this hercynian wrench fault. During the early stages of the Central Atlantic rifting, it acted as a major transform that accommodated the differential motion between Africa and Europe. The analysis of the oldest magnetic anomalies in the central Atlantic ocean highlights indeed that the continental breakup process initiated simultaneously over >1000 km, closely following the trend of the preexisting Appalachian structures from Florida to the Azores-Gibraltar transform fault. Both observations are consistent with the results of the present models that show: (i) a homogeneous strain distribution within the inherited structure and (ii) a strong directional softening that favors shearing parallel to the trend of ancient wrench faults .

Strain localization along preexisting lithospheric faults may also be invoked to explain linear arrays of seismicity far from any known plate boundary, such as the New Madrid seismic zone in the eastern US which parallels an avorted rift system of Proterozoic age: the Reelfoot rift [Zoback *et al.*, 1980; Johnston and Schweig, 1996]. Reactivation of preexisting

lithospheric scale faults may also facilitate magma transport across the continental lithosphere, producing linear volcanic chains, such as the post-Gondwana alkaline volcanism in South Africa [Moore *et al.*, 2008].

7. Conclusion

The coupled mechanical approach viscoplastic rheology / FE method applied to multi-domain lithospheric plate shows that mechanical anisotropy induced by CPO of olivine frozen in the lithospheric mantle during previous tectonics episodes is a major feature of continental deformation that may explain the reactivation of preexisting lithospheric scale shear zones during continental rifting or the existence of linear arrays of intraplate seismicity or intraplate volcanism along ancient faults or rifts. The association of strain localization and development of shearing components parallel to the trend of the inherited structures is a direct consequence of CPO-induced anisotropy. It may therefore be used to detect reactivation associated to a CPO-induced mechanical anisotropy in the lithospheric mantle. Analysis of the models results show that the reactivation of inherited lithospheric scale faults is mainly influenced by the orientation of inherited zone relatively to the imposed extension direction, but that the strength of the preexisting CPO as well as the olivine CPO in the surrounding domains also plays a significant role. It also highlights that the evolution of the CPO with progressive deformation may result in lateral variations in hardening rates and hence in rehomogenization of the deformation if other thermal or mechanical processes allowing further strain localization are not activated.

References

- Attoh, K., et al. (2005), The role of Pan-African structures in intraplate seismicity near the termination of the Romanche Fracture Zone, West Africa, *Journal of African Earth Sciences*, 43(5), 549-555.
- Babuska, V., et al. (2002), Seismic anisotropy of the French Massif Central and predisposition of Cenozoic rifting and volcanism by Variscan suture hidden in the mantle lithosphere, *Tectonics*, 21(4).
- Bai, Q., et al. (1991), High-temperature creep of olivine .1. Mechanical results for buffered samples, *Journal of Geophysical Research-Solid Earth and Planets*, 96(B2), 2441-2463.
- Bai, Q., and D. L. Kohlstedt (1992), High-temperature creep of olivine single-crystals .2. Dislocation-structures, *Tectonophysics*, 206(1-2), 1-29.
- Beacom, L. E., et al. (2000), A quantitative study of the influence of pre-existing compositional and fabric heterogeneities upon fracture-zone development during basement reactivation, paper presented at Conference on the Nature and Tectonic Significance of Fault Zone Weakening, Geological Soc Publishing House, London, England, Mar.
- Bernacki, M., et al. (2008), Level set framework for the numerical modelling of primary recrystallization in polycrystalline materials, *Scripta Materialia*, 58(12), 1129-1132.
- Bezerra, F. H. R., and C. Vita-Finzi (2000), How active is a passive margin? Paleoseismicity in northeastern Brazil, *Geology*, 28(7), 591-594.
- Bosworth, W., and M. R. Strecker (1997), Stress field changes in the Afro-Arabian rift system during the Miocene to Recent period, *Tectonophysics*, 278(1-4), 47-62.
- Bunge, H. J. (1982), Texture analysis in material science, *Buttleworth, London*.
- Butler, R. W. H., et al. (2008), Fabric anisotropy controls faulting in the continental crust, *Journal of the Geological Society*, 165, 449-452.
- Chang, H. K., et al. (1992), Tectonics and stratigraphy of the East Brazil Rift System - An overview, *Tectonophysics*, 213(1-2), 97-138.
- Chemenda, A., et al. (2002), Three-dimensional laboratory modelling of rifting: application to the Baikal Rift, Russia, *Tectonophysics*, 356(4), 253-273.
- Couvy, H., et al. (2004), Shear deformation experiments of forsterite at 11GPa-1400 degrees C in the multianvil apparatus, *European Journal of Mineralogy*, 16(6), 877-889.
- Darot, M., and Y. Gueguen (1981), High-temperature creep of forsterite single-crystals, *Journal of Geophysical Research*, 86(NB7), 6219-6234.

- Doukhan, N., et al. (1984), A TEM microstructural study of experimentally deformed Anita Bay dunite, in *Deformation of Ceramics II*, edited by R.E. Trexler and R.C. Bradt, New York, 307-319.
- Duclos, M., et al. (2005), Mantle tectonics beneath New Zealand inferred from SKS splitting and petrophysics, *Geophysical Journal International*, 163(2), 760-774.
- Durham, W. B., and C. Goetze (1977), Plastic flow of oriented single-crystals of olivine .1. Mechanical data, *Journal of Geophysical Research*, 82(36), 5737-5753.
- Durham, W. B., et al. (1977), Plastic flow of oriented single-crystals of olivine .2. Observations and interpretations on dislocation-structures, *Journal of Geophysical Research*, 82(36), 5755-5770.
- Goetze, C., and D. L. Kohlstedt (1973), Laboratory study of dislocation climb and diffusion in olivine, *Journal of Geophysical Research*, 78(26), 5961-5971.
- Grana, J. P., and R. M. Richardson (1996), Tectonic stress within the New Madrid seismic zone, *Journal of Geophysical Research-Solid Earth*, 101(B3), 5445-5458.
- Heintz, M., et al. (2003), Shear wave splitting in SE Brazil: an effect of active or fossil upper mantle flow, or both?, *Earth and Planetary Science Letters*, 211(1-2), 79-95.
- Helffrich, G. (1995), Lithospheric deformation inferred from teleseismic shear-wave splitting observations of the United-Kingdom, *Journal of Geophysical Research-Solid Earth*, 100(B9), 18195-18204.
- Herquel, G., et al. (1999), Teleseismic shear wave splitting and lithospheric beneath and across the Altyn Tagh fault, *Geophysical Research Letters*, 26(21), 3225-3228.
- Johnston, A. C., and E. S. Schweig (1996), The enigma of the New Madrid earthquakes of 1811-1812, *Annual Review of Earth and Planetary Sciences*, 24, 339-384.
- Jung, H., et al. (2006), Effect of water and stress on the lattice-preferred orientation of olivine, *Tectonophysics*, 421(1-2), 1-22.
- Keppie, J. D. (1989), Northern Appalachian terranes and their accretionary history, in *Terranes in the Circum-Atlantic Paleozoic orogens*, edited by R. D. Dallmeyer 159-192.
- Keranen, K., and S. L. Klemperer (2008), Discontinuous and diachronous evolution of the Main Ethiopian Rift: Implications for development of continental rifts, *Earth and Planetary Science Letters*, 265(1-2), 96-111.
- Knoll, M., et al. (2009), A multi-scale approach to model the anisotropic deformation of lithospheric plates, *Geochemistry Geophysics Geosystems*, in press.

- Lawyer, L. A. (1985), Mesozoic and Cenozoic reconstructions of the South Atlantic, *Tectonophysics*, 114, 233-254.
- Lebensohn, R. A., and C. N. Tome (1993), A self-consistent anisotropic approach for the simulation of plastic-deformation and texture development of polycrystals - Application to zirconium alloys, *Acta Metallurgica Et Materialia*, 41(9), 2611-2624.
- Mackwell, S. J., et al. (1985), The role of water in the deformation of olivine single-crystals, *Journal of Geophysical Research-Solid Earth and Planets*, 90(NB13), 1319-1333.
- Mainprice, D., et al. (2005), Pressure sensitivity of olivine slip systems and seismic anisotropy of Earth's upper mantle, *Nature*, 433(7027), 731-733.
- Martins, L. T., et al. (2008), Rift-related magmatism of the Central Atlantic magmatic province in Algarve, Southern Portugal, *Lithos*, 101(1-2), 102-124.
- Mazabraud, Y., et al. (2005), Characterisation of the seismological pattern in a slowly deforming intraplate region: Central and western France, *Tectonophysics*, 409(1-4), 175-192.
- Mickus, K., et al. (2007), Gravity analysis of the main Ethiopian rift, *Journal of African Earth Sciences*, 48(2-3), 59-69.
- Mocellin, K., et al. (2001), Toward large scale FE computation of hot forging process using iterative solvers, parallel computation and multigrid algorithms, *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 52(5-6), 473-488.
- Molinari, A., et al. (1987), A self-consistent approach of the large deformation polycrystal viscoplasticity, *Acta Metallurgica*, 35(12), 2983-2994.
- Moore, A., et al. (2008), Controls on post-Gondwana alkaline volcanism in Southern Africa, *Earth and Planetary Science Letters*, 268(1-2), 151-164.
- Morley, C. K., et al. (2004), Activation of rift oblique and rift parallel pre-existing fabrics during extension and their effect on deformation style: examples from the rifts of Thailand, *Journal of Structural Geology*, 26(10), 1803-1829.
- Morley, C. K. (2007), Variations in Late Cenozoic-Recent strike-slip and oblique-extensional geometries, within Indochina: The influence of pre-existing fabrics, *Journal of Structural Geology*, 29(1), 36-58.
- Olsen, K. H., et al. (1987), Rio-Grande Rift - An overview, *Tectonophysics*, 143(1-3), 119-139.
- Phakey, P., et al. (1972), Transmission electron microscopy of experimentally deformed olivine crystals, in *Flow and fracture of rocks*, *Geophys. Monogr. Ser.*, edited by H.C. Heard et al., AGU, Washington, D.C., 16, 117-138.

- Raleigh, C. B. (1968), Mechanisms of plastic deformation of olivine, *Journal of Geophysical Research*, 73(16), 5391-&.
- Raterron, P., et al. (2007), Pressure-induced slip-system transition in forsterite: Single-crystal rheological properties at mantle pressure and temperature, *Am. Miner.*, 92(8-9), 1436-1445.
- Ring, U. (1994), The influence of preexisting structure on the evolution of the Cenozoic Malawi Rift (East-African Rift System), *Tectonics*, 13(2), 313-326.
- Silver, P. G., et al. (2004), Seismic anisotropy, mantle fabric, and the magmatic evolution of Precambrian southern Africa, *South African Journal of Geology*, 107(1-2), 45-58.
- Sykes, L. R. (1978), Intraplate seismicity, reactivation of preexisting zones of weakness, alkaline magmatism, and other tectonism postdating continental fragmentation, *Reviews of Geophysics*, 16(4), 621-688.
- Theunissen, K., et al. (1996), Mechanisms of inheritance of rift faulting in the western branch of the East African Rift, Tanzania, *Tectonics*, 15(4), 776-790.
- Tikoff, B., et al. (2008), Lithospheric control on the initiation of the Yellowstone hotspot: Chronic reactivation of lithospheric scars, *International Geology Review*, 50(3), 305-324.
- Tommasi, A., et al. (1999), Upper mantle tectonics: three-dimensional deformation, olivine crystallographic fabrics and seismic properties, *Earth and Planetary Science Letters*, 168(1-2), 173-186.
- Tommasi, A., et al. (2000), Viscoplastic self-consistent and equilibrium-based modeling of olivine lattice preferred orientations: Implications for the upper mantle seismic anisotropy, *Journal of Geophysical Research-Solid Earth*, 105(B4), 7893-7908.
- Tommasi, A., and A. Vauchez (2001), Continental rifting parallel to ancient collisional belts: an effect of the mechanical anisotropy of the lithospheric mantle, *Earth and Planetary Science Letters*, 185(1-2), 199-210.
- Tommasi, A., et al. (2004), Seismic anisotropy and compositionally induced velocity anomalies in the lithosphere above mantle plumes: a petrological and microstructural study of mantle xenoliths from French Polynesia, *Earth and Planetary Science Letters*, 227(3-4), 539-556.
- Vauchez, A., et al. (1997), Why do continents break-up parallel to ancient orogenic belts?, *Terra Nova*, 9(2), 62-66.
- Vauchez, A., and C. J. Garrido (2001), Seismic properties of an asthenospherized lithospheric mantle: constraints from lattice preferred orientations in peridotite from the Ronda massif, *Earth and Planetary Science Letters*, 192(2), 235-249.

Vaucher, A., and A. Tommasi (2001), Wrench faults down to the asthenosphere: geological and geophysical evidence and thermomechanical effects, paper presented at Symposium on Intraplate Strike-Slip Deformation Belts, Geological Soc Publishing House, Strasbourg, FRANCE, Apr.

Visser, R. L. M., et al. (1997), Mylonitic deformation in upper mantle peridotites of the North Pyrenean Zone (France): implications for strength and strain localization in the lithosphere, *Tectonophysics*, 279(1-4), 303-325.

Wenk, H. R., et al. (1991), Modeling plastic-deformation of peridotite with self-consistent theory, *Journal of Geophysical Research-Solid Earth and Planets*, 96(B5), 8337-8349.

Wilson, D., et al. (2005), Lithospheric structure of the Rio Grande rift, *Nature*, 433(7028), 851-855.

Wilson, J. T. (1966), Did Atlantic close and then re-open?, *Nature*, 211(5050), 676.

Wu, X. H., et al. (2002), Magnetotelluric response and geoelectric structure of the Great Slave Lake shear zone, *Earth and Planetary Science Letters*, 196(1-2), 35-50.

Zoback, M. D., et al. (1980), Recurrent Intraplate Tectonism in the New Madrid Seismic Zone, *Science*, 209(4460), 971-976.

Table index

Slip Systems	CRSS	Stress exponent
(010)[100]	1	3
(001)[100]	1	3
(010)[001]	2	3
(100)[001]	3	3
{011}[100]	4	3
{111}[110]	50	3
{111}[011]	50	3

Table 1: Olivine slip systems and associated critical resolved shear stress and stress exponent used in the present models

Figure index

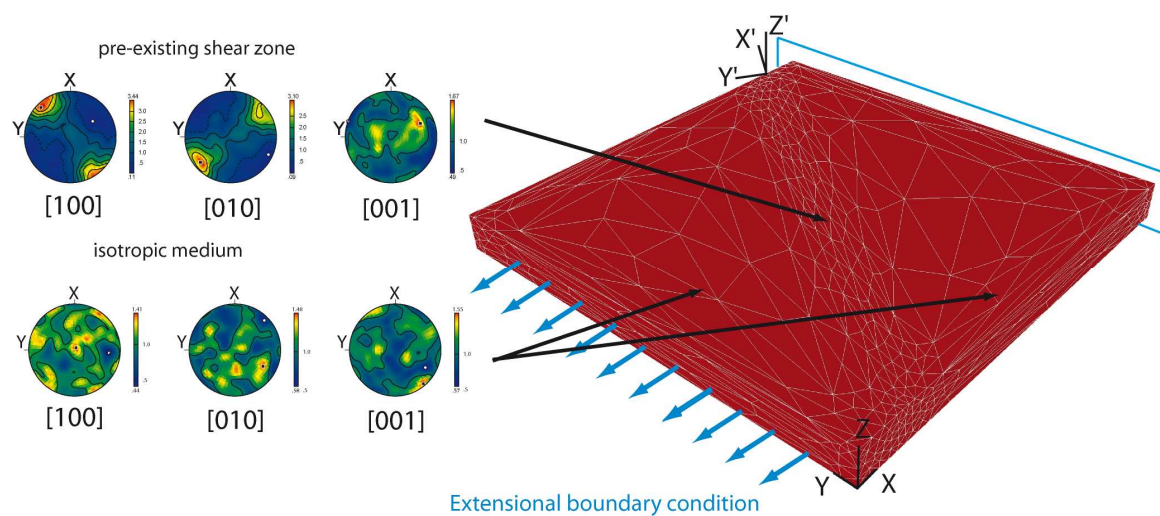


Figure 1: Boundary and initial conditions of the reference model

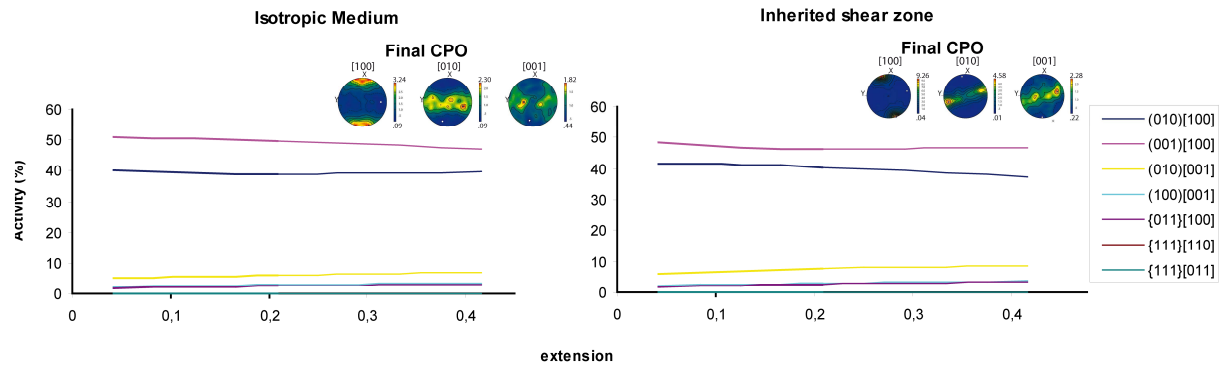


Figure 2: Evolution of the slip systems activity and final olivine CPO within the inherited shear-zone and in the surrounding medium

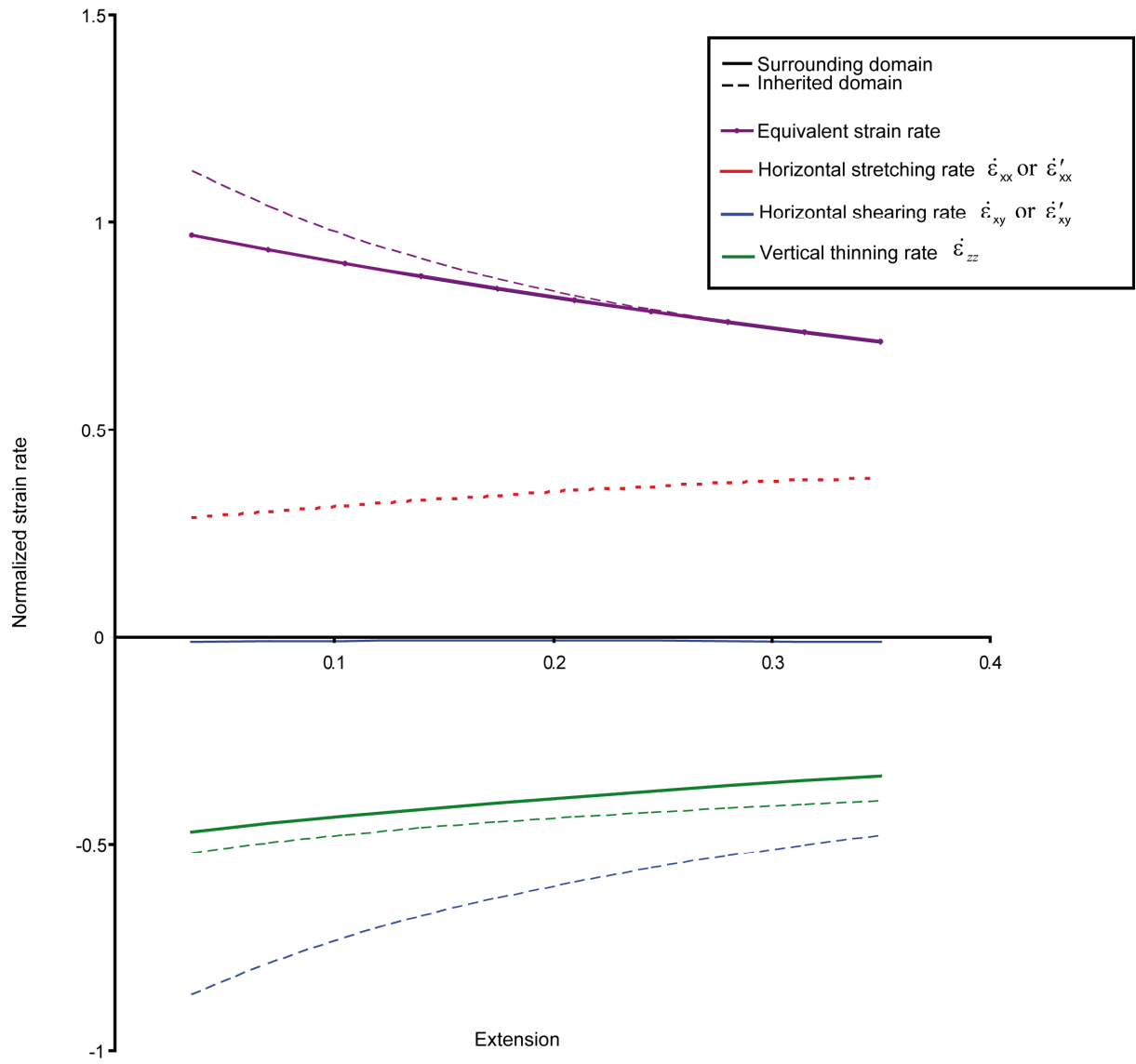


Figure 3: Evolution of the normalized strain rates within the inherited shear zone (dashed lines) and in the surrounding medium (full lines). All values are normalized relatively to the Von Mises equivalent strain rate in an isotropic medium.

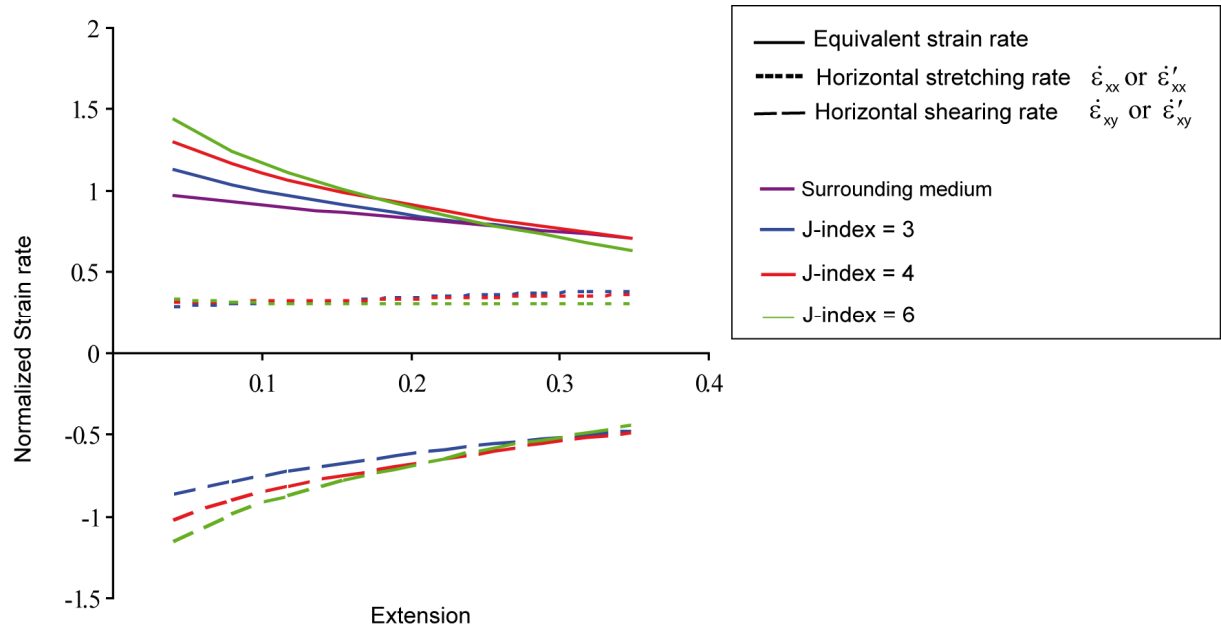


Figure 4: Effect of the initial CPO strength: evolution of the equivalent and horizontal shear strain rates ($\dot{\epsilon}'_{xy}$) within the inherited shear zone. All values are normalized relatively to the Von Mises equivalent strain rate in an isotropic medium.

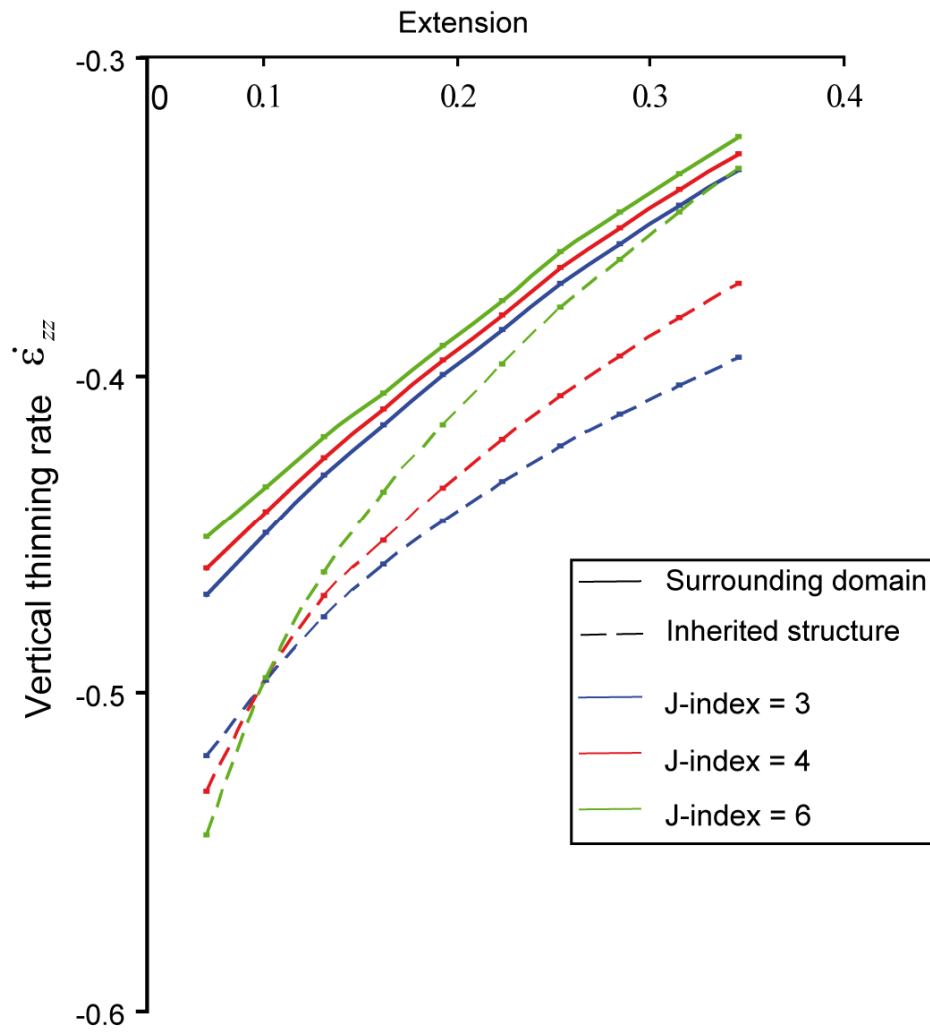


Figure 5: Effect of the initial CPO strength. Evolution of the vertical thinning rate in the inherited shear zone and in the surrounding medium for models with different initial CPO strengths (J indexes) in the inherited shear zone. All values are normalized relatively to the Von Mises equivalent strain rate in an isotropic medium.

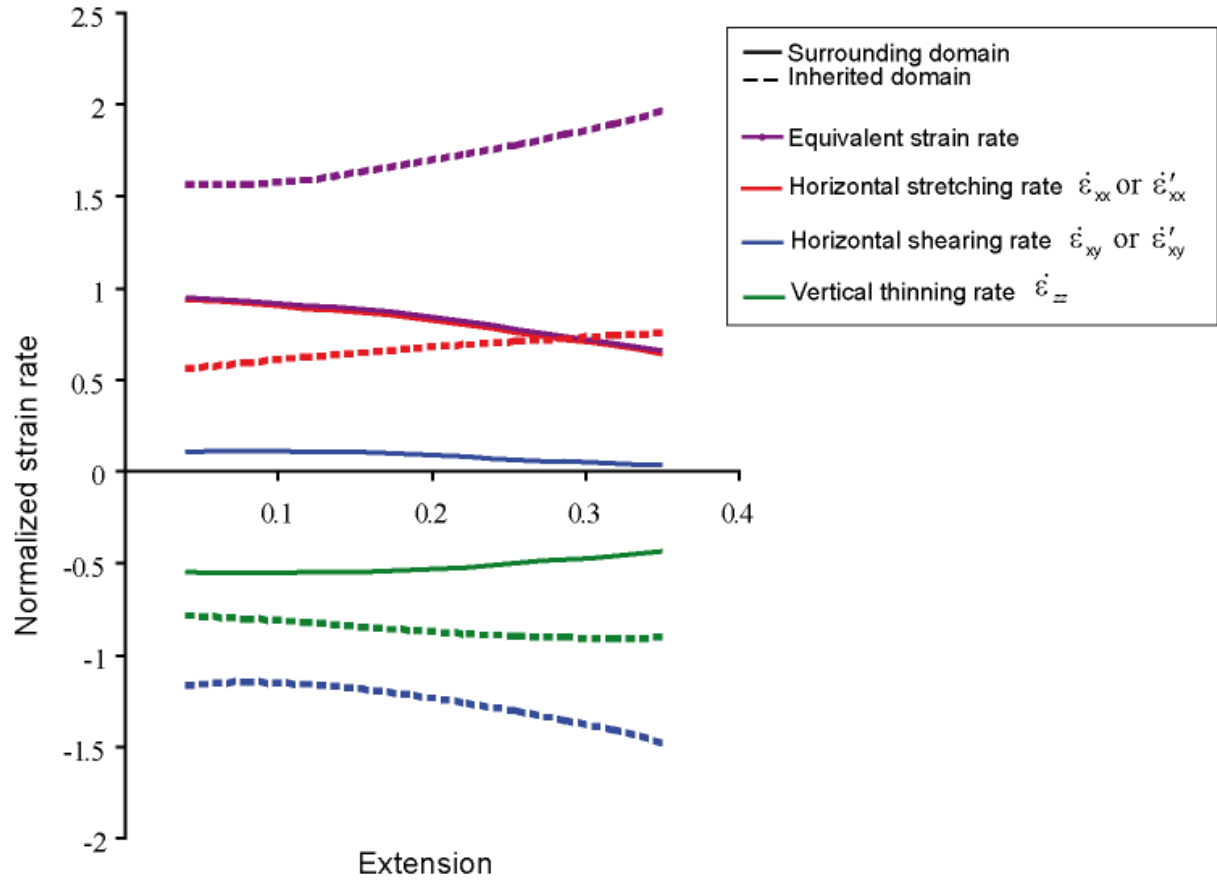


Figure 6: Effect of the initial CPO in the surrounding medium. Evolution of strain rates in the inherited shear zone (dashed lines) and in the surrounding medium (full lines) in a model where the initial olivine CPO in the inherited shear zone is as in the reference model and the surrounding medium has the maximum concentration of [100] axes parallel to the extension direction and the [001] maximum vertical. In contrast, to the preceding models where all values were normalized by the Von Mises equivalent strain rate for an isotropic medium, here they are normalized by the average Von Mises equivalent strain rate in the surrounding medium at the second time step (total extension of 0.004).

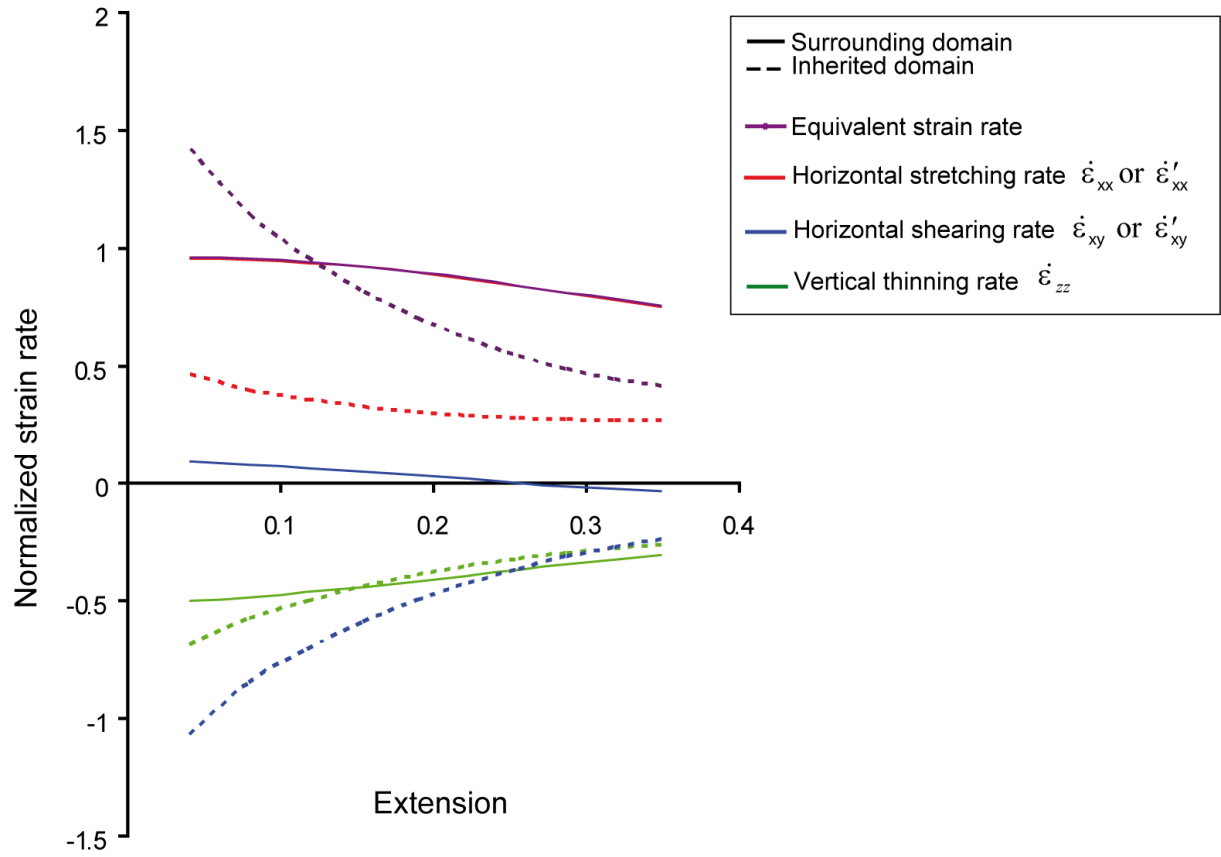


Figure 7: Effect of the initial CPO in the surrounding medium. Evolution of strain rates in the inherited shear zone (dashed lines) and in the surrounding medium (full lines) in a model where the initial olivine CPO in the inherited shear zone is as in the reference model and the surrounding medium has the maximum concentration of [100] axes normal to the extension direction and the [001] maximum vertical. All values are normalized by the average Von Mises equivalent strain rate in the surrounding medium at the second time step (total extension of 0.004).

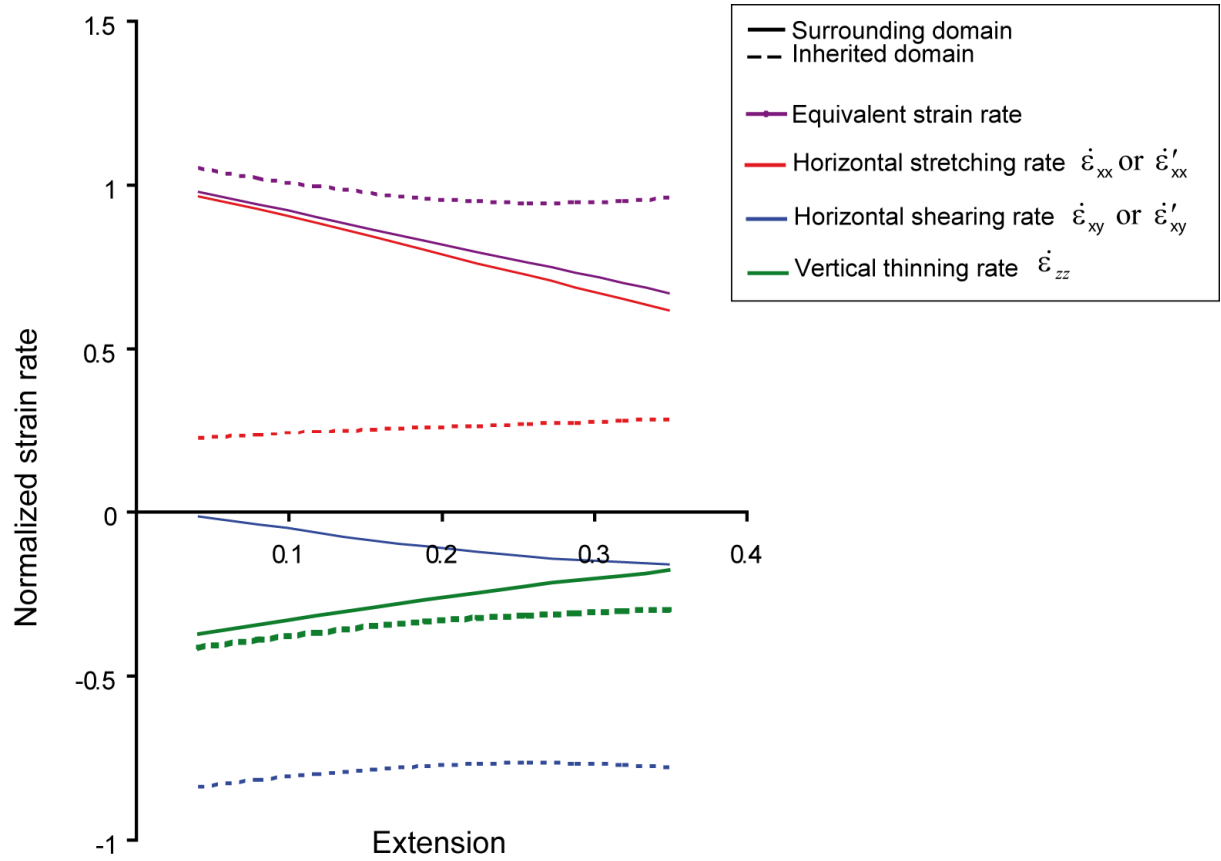


Figure 8: Effect of the initial CPO in the surrounding medium. Evolution of strain rates in the inherited shear zone (dashed lines) and in the surrounding medium (full lines) in a model where the initial olivine CPO in both the inherited shear zone and the surrounding medium has the maximum concentration of [100] axes horizontal at 45° of the extension direction, but the position of [010] and [001] axes are inversed: the [001] maximum is vertical in the inherited shear zone and horizontal outside. All values are normalized by the average Von Mises equivalent strain rate in the surrounding medium at the second time step (total extension of 0.004).

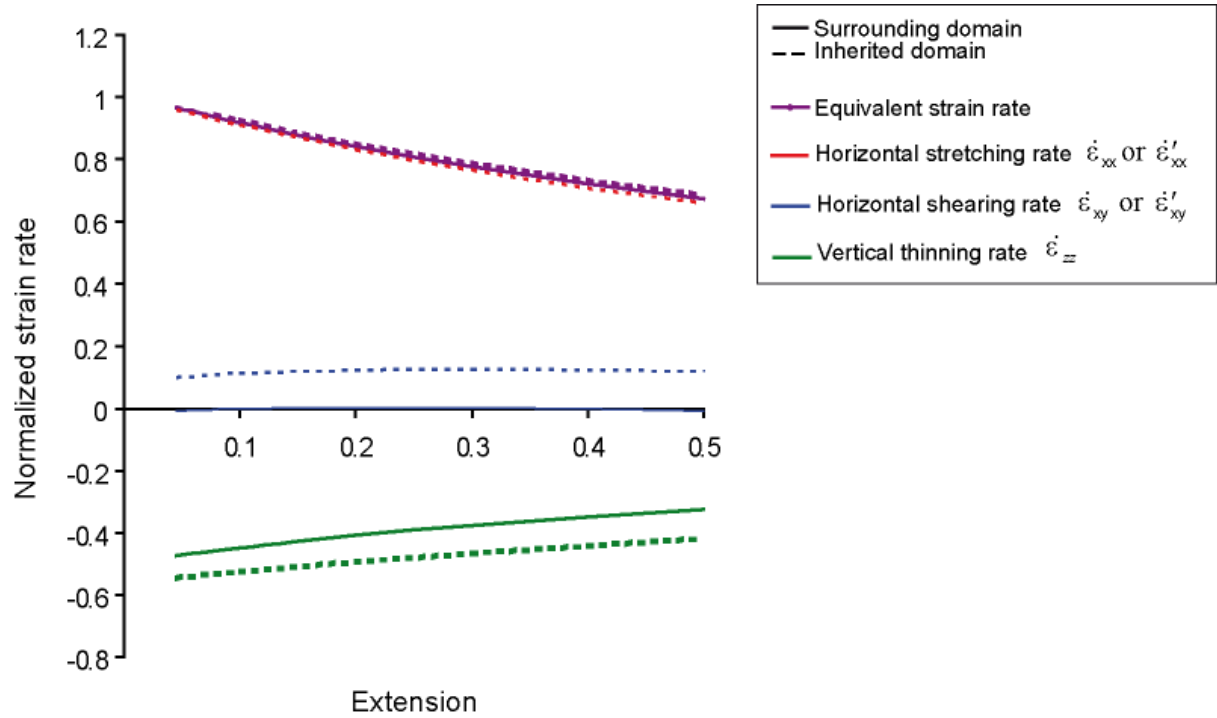


Figure 9: Effect of the orientation of the preexisting fault relatively to the imposed extension. Evolution of strain rates with increasing finite extension in a model where the inherited shear zone trend is parallel to the imposed extension. Dashed lines indicate average strain rates in the inherited shear zone and full lines, in the surrounding medium. The latter has initially a random olivine CPO. All values are normalized by the Von Mises equivalent strain rate in the surrounding medium at the 2 time step (total extension of 0.004).

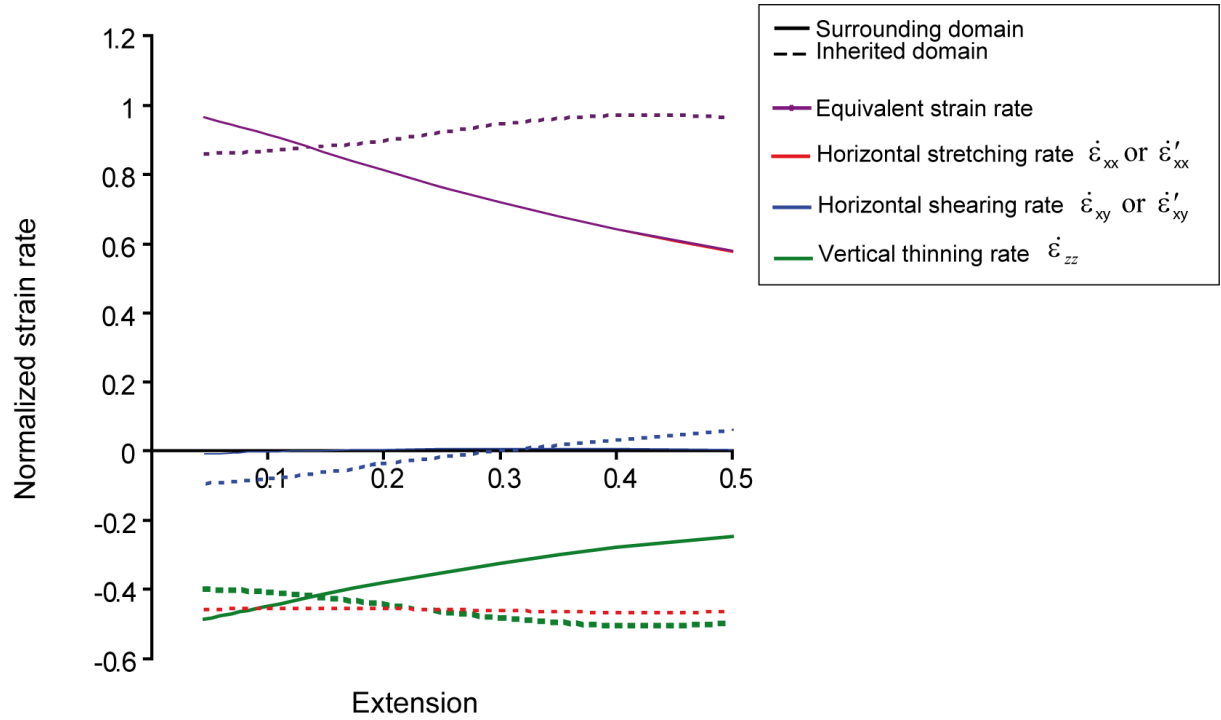


Figure 10: Effect of the orientation of the preexisting fault relatively to the imposed extension. Evolution of strain rates with increasing finite extension in a model where the inherited shear zone trend is normal to the imposed extension. Dashed lines indicate average strain rates in the inherited shear zone and full lines, in the surrounding medium. The latter has initially a random olivine CPO. All values are normalized by the Von Mises equivalent strain rate in the surrounding medium at the 2 time step (total extension of 0.004).

Chapitre 6 :

Crystal-scale control on plate tectonics : anisotropy-induced reactivation of lithospheric faults

Ce chapitre correspond à l'article *Tommasi et al. 2009* soumis à la revue Nature Géosciences et en cours de révision.

Crystal-scale control on plate tectonics: anisotropy-induced reactivation of lithospheric faults

Andréa Tommasi^{*}, Mickael Knoll^{*,***}, Alain Vauchez^{*}, Javier W. Signorelli^{**}, Catherine Thoraval^{*}, Roland Logé^{***}

^{*}*Geosciences Montpellier, CNRS & Université de Montpellier 2, Pl. E Bataillon, 34095 Montpellier cedex 5, France.* ^{**}*Instituto de Fisica de Rosario, CONICET, Universidad Nacional de Rosario, 2000 Rosario, Argentina.* ^{***}*MINES ParisTech, CEMEF – Center for Materials Forming, UMR CNRS 7635, BP207, 06904 Sophia Antipolis Cedex, France.*

Reactivation of large-scale faults or ancient plate boundaries is a major feature of plate tectonics. Its expression ranges from continental break-up along ancient collisional belts^{1, 2} to linear arrays of intraplate magmatism and seismicity^{3, 4}. We propose that reactivation results from an anisotropic mechanical behaviour of the lithospheric mantle due to a preferred orientation of anisotropic olivine crystals inherited from previous tectonic events. To test this hypothesis, we developed multi-scale models that explicitly consider an evolving anisotropic viscosity controlled by the orientation of olivine crystals in the mantle by coupling a viscoplastic self-consistent simulation of the deformation of a polycrystal to a 3D finite element model of the plate deformation. These models show a highly anisotropic behaviour, characterized by (i) dependence of strength on the orientation of the solicitation relative to the olivine crystals' orientation and (ii) development of shearing parallel to the dominant orientation of the main olivine intracrystalline slip system, that is, parallel to the pre-existing lithospheric mantle fabric. Based on these results, we propose that viscoplastic anisotropy is a key parameter in plate tectonics. It seeds strain localization, controlling the location and orientation of intraplate deformation zones that may evolve into new plate boundaries. Its characteristic signature: development of shearing parallel to the trend of the reactivated structures, is clearly documented, for instance, in the early stages of the Gondwana fragmentation and East African rifting⁵. In addition, viscoplastic anisotropy

effectively converts normal stresses into shearing, contributing to the long-lived nature of strike-slip faults and, at the plate tectonics scale, to the toroidal-poloidal partitioning of plate motions on Earth ^{6,7}.

Texture-induced viscoplastic anisotropy is an intrinsic feature of crystalline materials deforming by dislocation creep. It entails a directional dependence of the mechanical strength on the crystals orientation. This behaviour, expressed macroscopically as an anisotropic viscosity, results from both the anisotropy of the elastic tensor and the discrete nature of dislocation glide along densely-packed lattice directions on selected crystallographic planes. It depends on the crystal symmetry and, at the aggregate scale, on the orientation of the constitutive crystals or texture. Since they have less slip systems, low-symmetry minerals have a higher plastic anisotropy than cubic metals. Orthorhombic olivine is highly anisotropic, owing only 3 independent slip systems. At high temperature, an olivine crystal deforms up to 100 times faster if it activates the 'easy' (010)[100] system rather than the 'hard' (010)[001] system ^{8,9}. This plastic anisotropy leads to development of strong crystal preferred orientations (CPO or texture) ¹⁰, which are ubiquitous in naturally and experimentally deformed mantle rocks ¹¹⁻¹⁴. Moreover, seismic anisotropy provides evidence for coherent orientation of olivine crystals at the scale of hundreds of km in most upper mantle ^{15, 16}. Yet, in contrast to the large number of studies on the role of texture-induced plastic anisotropy on the deformation of cubic and hexagonal metallic alloys since the early works of Von Mises ¹⁷ and Hill ¹⁸, plastic anisotropy has been largely neglected in Earth Sciences.

Early studies on convection in fluids with a transversely isotropic viscosity showed nevertheless that anisotropy may change the convection length scales and lead to strain localization ¹⁹⁻²¹. More recent models highlighted that it also modifies the initiation times of convective instabilities in the mantle ^{22, 23}. Mechanical anisotropy due to olivine crystal preferred orientations in the lithospheric mantle was also proposed to explain the reactivation of ancient collisional structures during continental rifting ^{2, 24}. Multi-scale models of the deformation of a homogeneous, anisotropic mantle submitted to an axi-symmetric tension

show a strong directional softening, leading to strain localization and development of shearing when extensional stresses are oblique to the pre-existing mantle fabric ⁵. These models avoided simplifications to the viscosity tensor by using a viscoplastic self-consistent (VPSC) formalism ²⁵ to relate the crystal and large-scale plastic anisotropies, but they did not allow for the evolution of olivine textures and, hence, of the anisotropy in response to the new solicitation.

To fully account for an evolving anisotropic viscosity as a function of the orientation of olivine crystals in the mantle, we coupled the VPSC formalism to FORGE2005[®], a 3D finite-element mechanical (FEM) code. The coupling is performed through a set of 1000 olivine crystals associated with the integration point of each finite element. After each FEM time increment, the local velocity gradient tensor is used as a boundary condition for the VPSC simulation, leading to evolution of the polycrystal texture and viscosity. The updated polycrystal viscosity tensor is then used to calculate the stress field in the next FEM time step (Supplementary Information is linked to the online version of the paper at www.nature.com/nature, Fig. S1).

Models were run using a plate with aspect ratio 1.2 x 1 x 0.1 (Fig. 1) submitted to a constant divergent velocity or tensional stress on its left lateral boundary. Free slip conditions (normal velocities and shear stresses are null) are imposed on the opposite boundary. Boundaries normal to the Y and Z-axes are free (normal and tangential stresses are null). To analyse the deformation of a lithospheric plate containing a pre-existing lithospheric-scale shear zone, we use a multi-domain meshing tool to define a planar zone, 0.1 or 0.2 units wide, crosscutting the entire plate, at 45° (Fig. 1) or normal to the X axis (Fig. S2). This zone has an initial "wrench-fault type" olivine texture ²⁶; maximum concentrations of [100] and [010] axes are horizontal, parallel and normal to the shear zone trend, respectively (Fig. 1). This texture is coherent with shear wave splitting data in large-scale strike-slip faults and transform boundaries: fast polarization directions are parallel to the trend of the fault up to 50 km away from the surface expression of the fault (²⁷ and references herein) and in collisional belts ^{16, 26}.

²⁸. For numerical stability reasons, this initial texture is however significant weaker ($J_{\text{index}} = 3$, Fig. 1) than those from naturally deformed peridotites ($2 < J_{\text{index}} < 26$, peak at 8) ¹⁰. Olivine texture in the surrounding medium is initially random.

All models show an anisotropic behaviour, characterized by dependence of strength on the direction of solicitation relative to the texture orientation. Strain localization arises due to variations in texture orientation and intensity. Equivalent strain rates ($\dot{\epsilon}_{eq}$) are higher when the texture orientation relatively to the imposed extension results in high shear stresses on the 'easy' (010)[100] and (001)[100] slip systems in most crystals within a domain. Strain localizes therefore in the 'inherited shear zone' at 45° to the imposed extension (Figs. 1 & 2a), whereas the one normal to the extension has a higher initial strength, deforming slower than the surrounding medium (Fig. 2b).

Decomposition of the horizontal flow field in its poloidal (divergence) and toroidal (vorticity) components highlights that viscoplastic anisotropy produces lateral variations in the poloidal flow field (strain localization) and toroidal flow (strike-slip deformation) in the 'inherited shear zone' (Fig. 3). The later deforms therefore by transtension (Fig. 2): shearing parallel to its trend ($\dot{\epsilon}_{x'y'}$) accompanies stretching normal to it ($\epsilon_{y'y'}$) and vertical thinning (ϵ_{zz}). In contrast, the initially isotropic surroundings show only poloidal flow, which is the direct expression of the imposed boundary conditions. The intensity of the toroidal component depends to the first order on the orientation of the texture relative to the stress field, but also on the texture intensity. It is higher in 'inherited shear zones' oblique to the extension direction and for stronger textures (Fig. S3), but even a slight departure from perfect symmetry of the texture produces toroidal flow (Fig. 3) and horizontal shearing in the 'inherited shear zone' normal to the extension (Fig. 2b).

Strain localization depends on the texture contrast. It evolves in response to the evolution of olivine textures with increasing strain. In the present models, rotation of olivine [100] and [010] axes towards the maximum finite extension and shortening directions,

respectively (Fig.1) results in geometrical hardening in both the 'inherited shear zone' and the surroundings (Fig. 2), since shear stresses on the 'weak' (010)[100] and (001)[100] slip systems decrease. Faster texture evolution in the inherited domain for the 45° 'inherited shear zone' (in the surroundings for the 90° one) results in re-homogenization of the strain distribution (inversion of the strength contrast) at high strain. Texture evolution also depends on the strain regime; normal strains produce hardening, shearing parallel to the pre-existing texture, softening (Fig. S4).

Although extremely simple – they do not consider thermal effects and only test 2 end-member geometries – these models show that viscoplastic anisotropy due to preferred orientation of olivine crystals will trigger the reactivation of pre-existing lithospheric-scale faults if their orientation allows high shear stresses on them. Strain localization in the present models is nevertheless weak (strain rate ratios ≤ 2 , Fig. 2) compared to the one produced by changes in deformation mechanisms due to grain refinement²⁹ or viscous heating³⁰. These processes require nevertheless an already localized forcing, i.e., a pre-existing localization of the deformation³¹, usually produced in geodynamical models by the introduction of adhoc temperature anomalies or 'weak domains'. Viscoplastic anisotropy due to coherent orientations of olivine crystals, on contrary, is an intrinsic feature of lithospheric plates as evidenced by shear wave splitting¹⁶. We propose that it is a major 'seed' process for strain localization. In contrast to lateral variations of the geotherm, crustal thickness or damage zones associated with brittle faults that may also seed localization, its lifetime is not limited by heat diffusion, isostatic reequilibration, or erosion. Coherence between crustal structures of all ages and seismic anisotropy data¹⁶ suggest that texture-induced anisotropy may be preserved for >1Ga. It may therefore explain the reactivation of lithospheric-scale strike-slip or transpressional zones hundreds of m.y. old, as observed in the South Atlantic and East African rifts^{2,5}.

The present models show that deformation controlled by texture-induced viscoplastic anisotropy in the lithospheric mantle has a characteristic signature: development of shearing

parallel to the trend of the reactivated structures. Evolution from transtension parallel to the pre-existing to extension normal to the rift trend is observed in the East-African rift ³², in the North Atlantic ³³, in the Rhine graben ³⁴, as well as in the eastern Gondwana fragmentation ³⁵. This evolution is coherent with rift initiation controlled by anisotropy-induced reactivation of neoproterozoic shear zones in the eastern Gondwana breakup and East African rift, Caledonian structures in the North Atlantic, and Variscan wrench faults in the Rhine graben. It also suggests that the role of mechanical anisotropy decreases in mature rift systems, in agreement with the present models' prediction that evolution of the olivine texture leads to progressive geometric hardening and, hence, in a failed rift, unless thermo-mechanical or magmatic processes leading to further softening are activated in the thinned lithospheric domain.

Texture-induced viscoplastic anisotropy may also explain the reactivation of large-scale wrench faults during successive collisional and extensional episodes, like the Newfoundland-Azores-Gibraltar Fault zone, which acted as a dextral strike-slip boundary during the Hercynian orogeny ³⁶ and a major transform accommodating the differential motion between Africa and Europe during the Central Atlantic opening. It may also account for intraplate seismic arrays, like the New Madrid zone ⁴ or the present activity along the hercynian South Armorican shear zone ³⁷. Focal mechanisms ^{37, 38} in both zones have a strong strike-slip component, as expected for the reactivation of the NE-SW and NW-SE trending mantle fabric imaged by shear wave splitting in the southeastern US and Brittany, respectively ^{39, 40}.

Finally, texture-induced mechanical anisotropy of the lithospheric mantle effectively converts poloidal flow (convergent or divergent plate motions) into toroidal (strike-slip) motions. Shearing parallel to the pre-existing mantle texture is only suppressed when the olivine texture is perfectly symmetric relative to the stress field. The toroidal-poloidal partitioning depends on the orientation of the texture relative to the solicitation; the ratio between the vorticity and the divergence of the horizontal velocity field varying from 0.18 to 0.28 in inherited shear zones normal and at 45° to the imposed extension, respectively (Fig.

3). These values are in the same range than the average toroidal-poloidal partitioning ratio in the Earth (0.3-0.4⁷), suggesting that texture-induced viscoplastic anisotropy in the mantle may account for a large part of the Earth's mantle toroidal flow and hence explain belt-parallel transport recorded as strain partitioning in the crust and fast shear waves polarization in past and present convergent boundaries²⁸.

Methods

A viscoplastic self-consistent formalism²⁵ is used to relate the crystal and polycrystal mechanical behaviours and to predict the texture evolution. Interaction between the crystal and the polycrystal is calculated using the Eshelby formalism⁴¹; each crystal is considered as an inclusion embedded in a homogeneous equivalent medium that behaves as the average of all crystals. At the crystal scale, deformation is accommodated by dislocation glide on discrete slip systems, whose relative strength - or critical resolved shear stress - depends on the temperature, pressure, and chemical environment. In the present simulations, critical resolved shear stresses (τ_0) and stress exponents (n) derived from high-temperature experiments on dry olivine crystals^{8,9} were used: $\tau_0^{[100](010)} = \tau_0^{[100](001)} = 1/2 \tau_0^{[001](010)} = 1/3 \tau_0^{[001](100)}$ and $n=3$ for all systems. Two additional slip systems, which are not observed in olivine: $\{111\}\langle 110 \rangle$ and $\{-111\}\langle 110 \rangle$, with $\tau_0 = 50 * \tau_0^{[100](010)}$ are added to ensure convergence. They never accommodate > 1% of the total strain.

3D finite-element mechanical modelling. FORGE2005[®] is a commercialized FEM software using an updated Lagrangian scheme. The finite element formulation is based on a mixed velocity-pressure formulation with an enhanced (P1+/P1) 4-node tetrahedral element⁴². The mesh used in the present simulations is composed of ca. 12000 linear tetrahedral elements. Thermal effects are not considered.

<received> Style tag for received and accepted dates.

References

1. Wilson, J. T. Did the Atlantic close and then re-open? Nature 211, 676-681 (1966).

2. Vauchez, A., Barruol, G. & Tommasi, A. Why do continents break up parallel to ancient orogenic belts? *Terra Nova* 9, 62-66 (1997).
3. Sykes, L. R. Intraplate seismicity, reactivation of preexisting zones of weakness, alkaline magmatism, and other tectonism postdating continental fragmentation. *Rev. Geophys. Space Phys.* 13, 621-688 (1978).
4. Zoback, M. D. et al. Recurrent Intraplate Tectonism in the New Madrid Seismic Zone. *Science* 209, 971-976, doi: 10.1126/science.209.4460.971 (1980).
5. Tommasi, A. & Vauchez, A. Continental rifting parallel to ancient collisional belts: An effect of the mechanical anisotropy of the lithospheric mantle. *Earth Planet. Sci. Lett.* 185, 199-210 (2001).
6. Bercovici, D. The generation of plate tectonics from mantle convection. *Earth Planet. Sci. Lett.* 205, 107-121 (2003).
7. Lithgow-Bertelloni, C., Richards, M., Ricard, Y., O'Connell, R. J. & Engebretson, D. C. Toroidal-poloidal partitioning of plate motions since 120 Ma. *Geophys. Res. Lett.* 20, 375-378 (1993).
8. Durham, W. B. & Goetze, G. Plastic flow of oriented single crystals of olivine. 1. Mechanical data. *J. Geophys. Res.* 82, 5737-5753 (1977).
9. Bai, Q., Mackwell, S. J. & Kohlstedt, D. L. High-temperature creep of olivine single crystals. 1. Mechanical results for buffered samples. *J. Geophys. Res.* 96, 2441-2463. (1991).
10. Tommasi, A., Mainprice, D., Canova, G. & Chastel, Y. Viscoplastic self-consistent and equilibrium-based modeling of olivine lattice preferred orientations. Implications for upper mantle seismic anisotropy. *J. Geophys. Res.* 105, 7893-7908 (2000).
11. Ben Ismail, W. & Mainprice, D. An olivine fabric database: an overview of upper mantle fabrics and seismic anisotropy. *Tectonophysics* 296, 145-158 (1998).
12. Bystricky, M., Kunze, K., Burlini, L. & Burg, J. P. High shear strain of olivine aggregates; rheological and seismic consequences. *Science* 290, 1564-1567 (2000).

13. Nicolas, A., Boudier, F. & Boullier, A. M. Mechanism of flow in naturally and experimentally deformed peridotites. *Am. J. Sci.* 273, 853-876 (1973).
14. Zhang, S., Karato, S., Fitzgerald, J. D., Faul, U. H. & Zhou, Y. Simple shear deformation of olivine aggregates. *Tectonophysics* 316, 133-152 (2000).
15. Montagner, J.-P. & Tanimoto, T. Global anisotropy in the upper mantle inferred from the regionalization of phase velocities. *J. Geophys. Res.* 95, 4797-4819 (1990).
16. Wuestefeld, A., Barruol, G. & Bokelmann, G. Shear-wave splitting database.
<http://www.gm.univ-montp2.fr/splitting/> (accessed on December, 2008).
17. Von Mises, R. V. Mechanik der plastischen Formänderung von Kristallen. *Zeitschr. Angew. Math. Mech.* 8, 161-185 (1928).
18. Hill, R. A theory of yielding and plastic flow of anisotropic metals. *Proc. Roy. Soc. Lond.* A193, 281-297 (1948).
19. Christensen, U. Some geodynamical effects of anisotropic viscosity. *Geophys. J. R. Astron. Soc.* 91, 711-736 (1987).
20. Honda, S. Strong anisotropic flow in a finely layered asthenosphere. *Geophys. Res. Lett.* 128, 1454-1457 (1986).
21. Richter, F. M. & Daly, S. F. Convection models having a multiplicity of large horizontal scales. *J. Geophys. Res.* 83, 4951-4956 (1978).
22. Lev, E. & Hager, B. H. Rayleigh-Taylor instabilities with anisotropic lithospheric viscosity. *Geophys. J. Int.* 173, 806-814 (2008).
23. Pouilloux, L., Kaminski, E. & Labrosse, S. Anisotropic rheology of a cubic medium and implications for geological materials. *Geophys. J. Int.* 170, 876-885 (2007).
24. Vauchez, A., Tommasi, A. & Barruol, G. Rheological heterogeneity, mechanical anisotropy, and tectonics of the continental lithosphere. *Tectonophysics* 296, 61-86 (1998).

25. Lebensohn, R. A. & Tomé, C. N. A self-consistent anisotropic approach for the simulation of plastic deformation and texture development of polycrystals: Application to zirconium alloys. *Acta metall. mater.* 41, 2611-2624 (1993).
26. Tommasi, A., Tikoff, B. & Vauchez, A. Upper mantle tectonics: Three-dimensional deformation, olivine crystallographic fabrics and seismic properties. *Earth Planet. Sci. Lett.* 168, 173-186 (1999).
27. Vauchez, A. & Tommasi, A. in *Intraplate Strike-Slip Deformation Belts*, Geol. Soc. London Spec. Publ. (eds. Storti, F., Holdsworth, R. E. & Salvini, F.) 15-24 (Geol. Soc. London, London, 2003).
28. Vauchez, A. & Nicolas, A. Mountain building: Strike-parallel displacements and mantle anisotropy. *Tectonophysics* 185, 183-201 (1991).
29. Braun, J. et al. A simple parameterization of strain localization in the ductile regime. *J. Geophys. Res.* 104, 25,167-25,182. (1999).
30. Regenauer-Lieb, K. & Yuen, D. A. Positive feedback of interacting ductile faults from coupling of equation of state, rheology and thermal-mechanics. *Phys. Earth Planet. Int.* 142, 113-135 (2004).
31. Montesi, L. G. J. & Zuber, M. T. A unified description of localization for application to large-scale tectonics. *J. Geophys. Res.* 107, 2045, doi:10.1029/2001JB000465 (2002).
32. Bosworth, W. & Strecker, M. R. Stress field changes in the Afro-Arabian rift system during the Miocene to Recent period. *Tectonophysics* 278, 47-62 (1997).
33. Geoffroy, L., Bergerat, F. & Angelier, J. Tectonic evolution of the Greenland-Scotland Ridge during the Paleogene; new constraints. *Geology* 22, 653-656 (1994).
34. Schumacher, M. E. Upper Rhine Graben: role of preexisting structures during rift evolution. *Tectonics* 21, 1-17 (2002).

35. Powell, C. M. A., Roots, S. R. & Veewers, J. J. Pre-breakup continental extension in East Gondwanaland and the early opening of the eastern Indian Ocean. *Tectonophysics* 155, 261-283 (1988).
36. Keppie, J. D. in *Terranes in the Circum-Atlantic Paleozoic orogens* (ed. Dallmeyer, R. D.) 159-192 (1989).
37. Mazabraud, Y., Bethoux, N., Guilbert, J. & Bellier, O. Evidence for short-scale stress field variations within intraplate central-western France. *Geophys. J. Int.* 160, 161-178 (2005).
38. Herrmann, R. B. & Canas, J.-A. Focal mechanism studies in the New Madrid seismic zone. *Bulletin of the Seismological Society of America* 68, 1095-1102 (1978).
39. Barruol, G., Silver, P. G. & Vauchez, A. Seismic anisotropy in the eastern United States: Deep structure of a complex continental plate. *J. Geophys. Res.* 102, 8329-8348 (1997).
40. Judenherc, S., Granet, M., Brun, J.-P. & Poupinet, G. The Hercynian collision in the Armorican Massif; evidence of different lithospheric domains inferred from seismic tomography and anisotropy. *Bull. Soc. geol. France* 174, 45-57 (2003).
41. Eshelby, J. D. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems. *Proc. R. Soc. London A* 241, 376-396 (1957).
42. Chenot, J.-L., Fourment, L. & Mocellin, K. Numerical treatment of contact and friction in FE simulation of forming processes. *J. Mater. Process. Technol.* 125-126, 45-52 (2002).

<ack> Style tag for the Acknowledgements and the Competing Interests statement.

Correspondence and requests for materials should be addressed to A.T. (e-mail: andrea.tommasi@gm.univ-montp2.fr).

‘This work is the outcome of a study on the effect of olivine fabrics on the mechanical behaviour of the continental lithosphere started by A. Vauchez and A. Tommasi. M. Knoll ran all simulations as part of his PhD under the supervision of A. Tommasi and R. Logé. J.

Signorelli performed the coupling between the viscoplastic self-consistent polycrystalline (VPSC) and the finite element codes. C. Thoraval assisted in the analysis of the modelled flow fields.'

Figure captions.

Figure 1. Geometry, boundary conditions, and shear strain ϵ_{xy} distribution in a model with an 'inherited shear zone' at 45° of the imposed extension direction after a total stretching of 40%. Texture-induced anisotropy results in strain localization and higher shear strain in the 'inherited shear zone'. Evolution of the olivine texture within the 'inherited shear zone' may be evaluated by comparing the initial (upper left) and final (bottom right) textures. Bottom left: slip systems in the olivine crystal, 'easy' (010)[100] and (001)[100] systems are outlined by dark grey shading and thicker lines parallel to the slip direction.

Figure 2. Evolution of the strain rate (normalized by the Von Mises equivalent strain rate $\dot{\epsilon}_{eq} = \sqrt{\frac{2}{3}(\dot{\epsilon}_{ij}\dot{\epsilon}_{ij})}$ in the isotropic surrounding medium) in the 'inherited shear zone' (thick lines) and the surroundings (thin lines) as a function of the total finite stretching. When the 'inherited shear zone' is at 45° to the imposed extension (a), analysis of the Von Mises equivalent strain rate shows that strain is initially localized within the 'inherited shear zone', but faster hardening due to reorientation of the texture relatively to the external domain leads to delocalization for an extension >35%. Reorientation of the texture also results in decrease of the shear rate parallel to the inherited shear zone ($\dot{\epsilon}_{x'y'}$) and increase of the extension rate normal to it ($\dot{\epsilon}_{y'y'}$); the strain regime evolves from sinistral transtension to extension. When the 'inherited shear zone' is normal to the imposed extension (b), strain is initially localized outside the shear zone, but evolution of texture leads to an increase in strain rates within it and a decrease outside it. Shearing $\dot{\epsilon}_{x'y'}$ within the inherited shear zone results from

a slight asymmetry in the initial texture (Fig. S2); reorientation of the texture with increasing strain results in inversion of the shear sense. In contrast, shearing $\dot{\epsilon}_{xy}$ in the surroundings is negligible in both models, because the texture has a maximum concentration of [100] parallel to the imposed extension.

Figure 3. Poloidal and toroidal partitioning, represented as maps of the divergence (a,c) and vorticity (b,d) of the horizontal flow field, respectively, in models with an 'inherited shear zone' at 45° (a,b) or normal (c,d) to the imposed extension. Higher divergence marks localization of the poloidal flow in the inherited texture domain when the latter is oblique to the imposed extension (a) and outside it when it is normal to it (b). Larger divergence variations (scale bars in a and b are different) denote stronger localization in the 45° model. Toroidal flow, indicated by non-null vorticity, is restricted to the domains with an inherited texture. Flow in the surroundings is purely poloidal, in agreement with the boundary conditions (extension parallel to the X direction). The vorticity variation range is the same in the two models and is twice the divergence range in the 45° model, highlighting the efficiency of texture-induced anisotropy in the generation of toroidal flow. Note that divergence and vorticity variations are directly related to changes in the olivine texture, being roughly homogeneous within each domain, and that they do not depend on the thickness of the 'inherited shear zone' that is wider in the 90° model than in the 45° one.

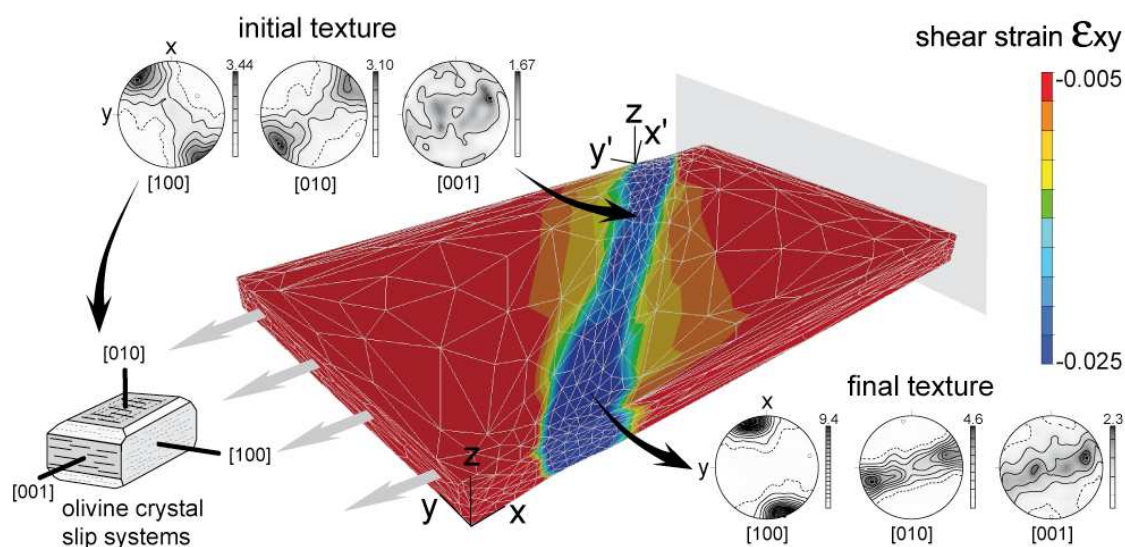


Figure 1

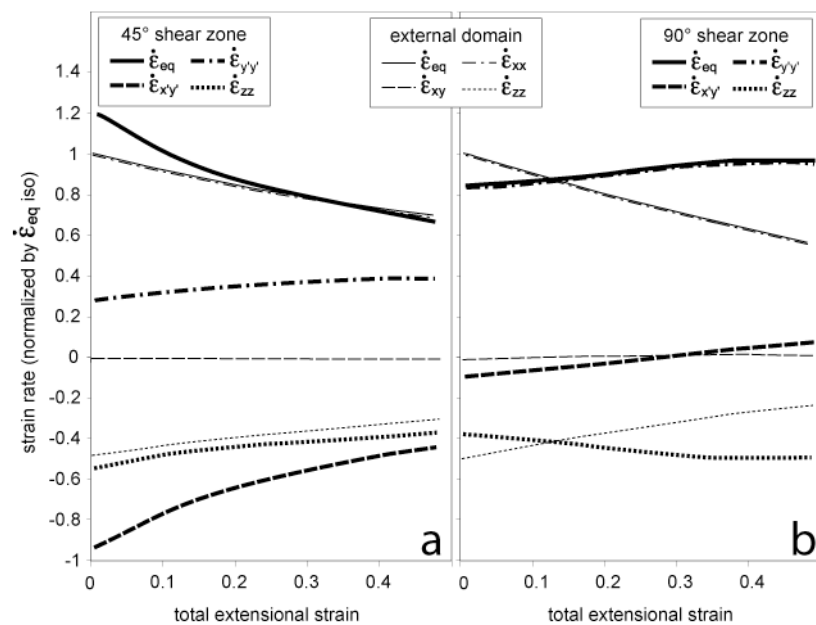


Figure 2

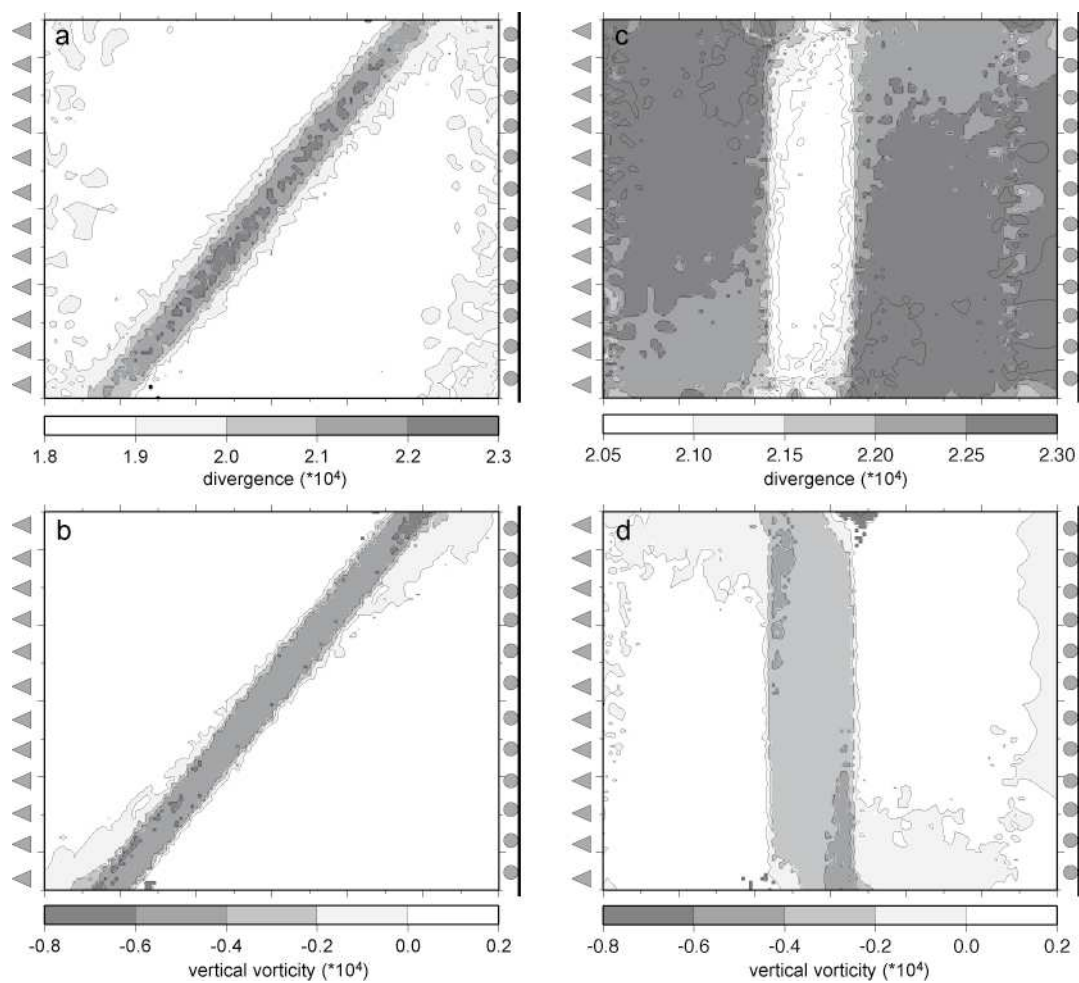


Figure 3

Supplementary material to "Crystal-scale control on plate tectonics: anisotropy-induced reactivation of lithospheric faults"

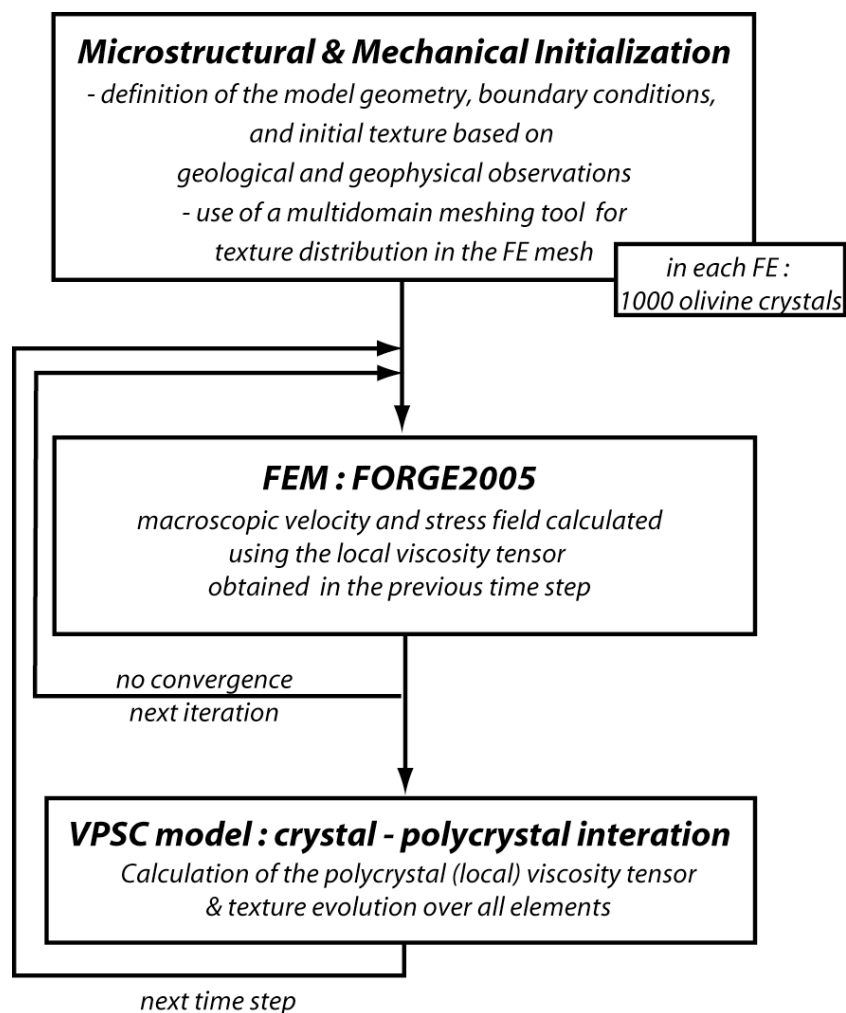
Andréa Tommasi^{*}, Mickael Knoll^{*,***}, Alain Vauchez^{*}, Javier W. Signorelli^{**}, Catherine Thoraval^{*}, Roland Logé^{***}

^{*}*Geosciences Montpellier, CNRS & Université de Montpellier 2, Pl. E Bataillon, 34095 Montpellier cedex 5, France.* ^{**}*Instituto de Fisica de Rosario, CONICET, Universidad Nacional de Rosario, 2000 Rosario, Argentina.* ^{***}*MINES ParisTech, CEMEF – Center for Materials Forming, BP207, 06904 Sophia Antipolis Cedex, France.*

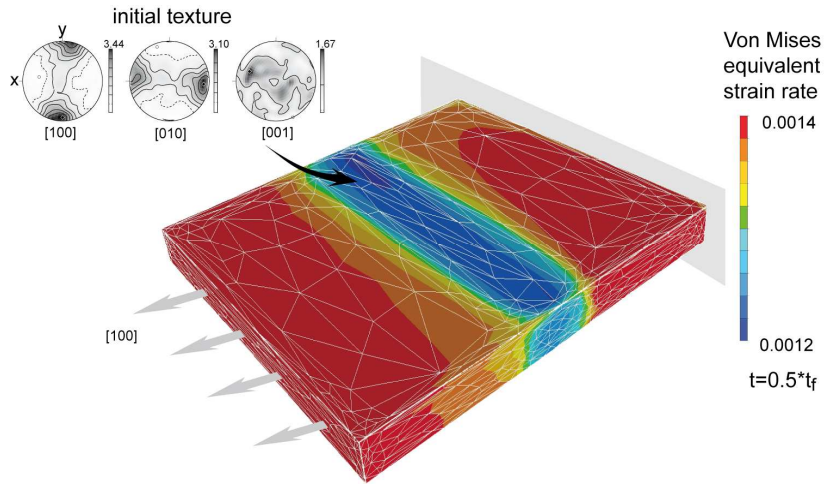
Supplementary Discussion:

Texture-induced viscoplastic anisotropy of olivine-rich rocks - comparison between model predictions and experimental data: High-pressure and high-temperature torsion experiments on olivine aggregates in the dislocation creep regime show about 15 to 20% strain weakening before steady-state behaviour¹. The evolution is not linear; deviatoric stresses decrease fast by ca. 15% between shear strains of 0.1 and 0.5 and much slower after that. Deviatoric stresses are 20% lower than the peak stress at a shear strain of 5. This decrease in deviatoric stress is correlated to the evolution of olivine texture (crystal preferred orientation), which is fast for shear strains ≤ 1 and slows down after, probably due to the increasing contribution of dynamic recrystallization. Considering a stress exponent of 3, a contrast in deviatoric stress by a factor 1.2 will correspond to a factor 1.7 in strain rates. This factor is slightly higher than the strain rate ratios observed in the present models, in which the initial texture in the 'inherited shear zone' is weak (Fig. 1). It is reproduced if stronger textures, similar to those produced in the experiments and observed in naturally deformed peridotites, are used in the 'inherited shear zone' (Fig. S4).

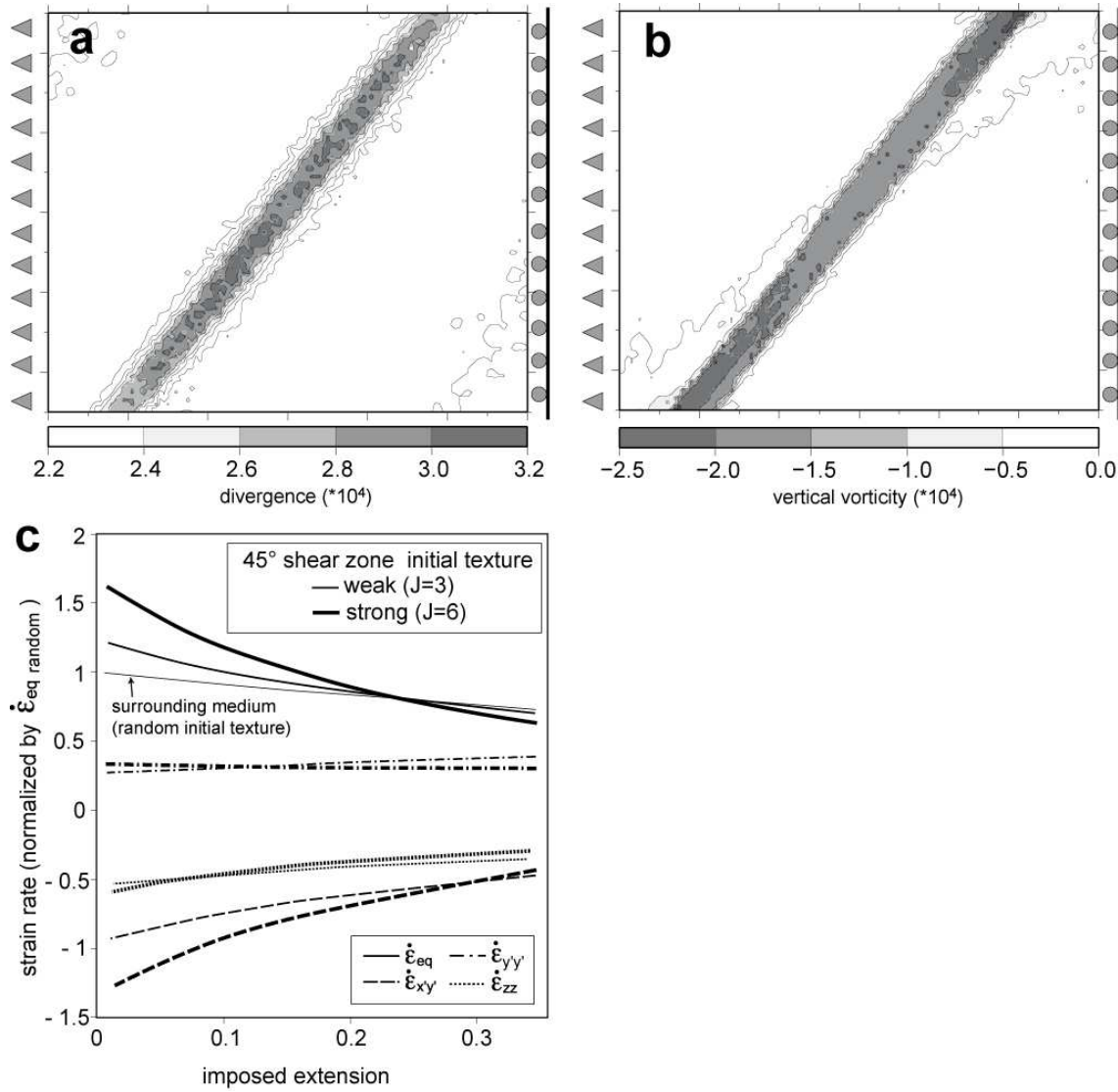
Supplementary Figures:



Supplementary Figure S1: Scheme of the multi-scale anisotropic models.

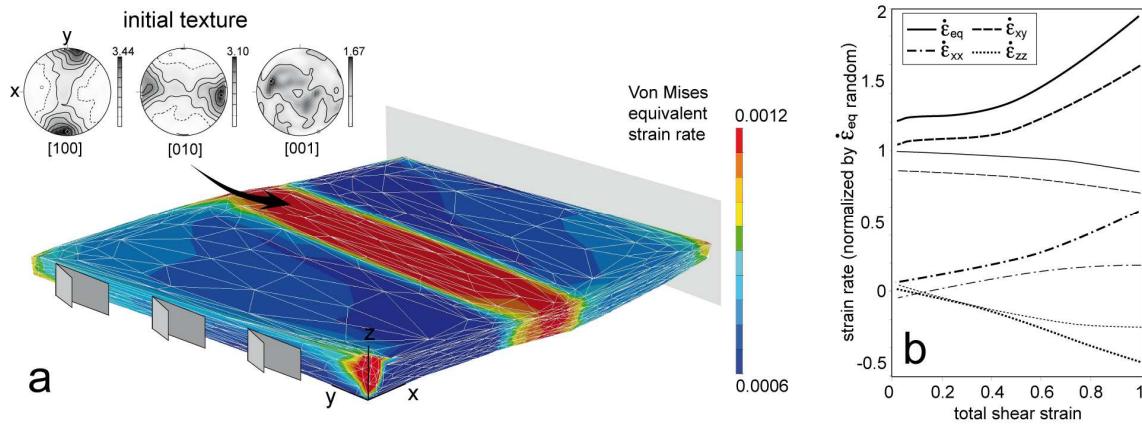


Supplementary Figure S2: Geometry, boundary conditions, and Von Mises equivalent strain rate $\dot{\epsilon}_{eq}$ distribution in a model with an 'inherited shear zone' normal to the imposed extension direction after a total stretching of 20%. Texture-induced anisotropy results in lower strain rates in the 'inherited shear zone'. Upper left insert displays the initial olivine texture within the 'inherited shear zone'.



Supplementary Figure S3: Results for a model with an 'inherited wrench fault' (thick lines) at 45° to the imposed extension (geometry and boundary conditions as in Fig. 1), but with an initial texture twice as strong ($J=6$) as the one presented in Figs. 1 & 2 ($J=3$). The J index is a measure of the texture concentration based on the integral of the orientation distribution function. For comparison, naturally deformed peridotites have J indexes ranging from 2 to 26, with a peak at 8^2 . Poloidal and toroidal partitioning, represented as maps of the divergence (a) and vorticity (b) of the horizontal flow field, respectively. Higher divergence marks localization of the poloidal flow in the inherited texture domain. Toroidal flow is restricted to the inherited texture. Flow in the surroundings is purely poloidal, in agreement with the boundary conditions (extension parallel to the X direction). Note that the divergence and vorticity variation ranges are respectively 2 and 3 times larger than those in the 45° model with a weaker initial texture

(Fig. 3), highlighting that stronger textures result in more effective strain localization and stronger toroidal flow. (c) Evolution of the strain rate (normalized by the initial Von Mises equivalent strain rate $\dot{\epsilon}_{eq} = \sqrt{\frac{2}{3}(\dot{\epsilon}_{ij}\dot{\epsilon}_{ij})}$ in the surrounding medium) as a function of the total finite. In agreement with the change in divergence and vorticity ranges relatively to the reference model (J=3), the more concentrated texture results in a marked increase in horizontal shearing parallel to the pre-existing structure trend, but in limited enhancement of the normal strain rates (stretching and vertical thinning).



Supplementary Figure S4: (a) Geometry, boundary conditions, and Von Mises equivalent strain rate $\dot{\epsilon}_{eq}$ distribution in a model in which strike-slip motion is imposed parallel to the 'inherited shear zone' after a total shear strain of 0.75. Texture-induced anisotropy results in progressive strain localization in the 'inherited shear zone' that deforms 2 times faster than the surroundings. Upper left insert displays the initial olivine texture in the 'inherited shear zone'. (b) Evolution of the strain rate (normalized by the Von Mises equivalent strain rate $\dot{\epsilon}_{eq} = \sqrt{\frac{2}{3}(\dot{\epsilon}_{ij}\dot{\epsilon}_{ij})}$ in a medium with a random texture submitted to the same boundary conditions, i.e., the initial equivalent strain rate in the surrounding medium) as a function of the total shear strain in a model in which strike-slip motion is imposed parallel to the 'inherited shear zone' (geometry and boundary conditions as in Fig. S4). Texture evolution in both domains results in increasing strain localization in the 'inherited shear zone'. Extension normal to the shear zone and thinning arise due to a slight obliquity of the texture relative to its trend.

Cited references

- ¹ Bystricky, M., Kunze, K., Burlini, L., & Burg, J.P., High shear strain of olivine aggregates; rheological and seismic consequences. *Science* 290 (5496), 1564-1567 (2000).
- ² Tommasi, A., Mainprice, D., Canova, G., & Chastel, Y., Viscoplastic self-consistent and equilibrium-based modeling of olivine lattice preferred orientations. Implications for upper mantle seismic anisotropy. *J. Geophys. Res.* 105, 7893-7908 (2000).

Conclusion générale et perspectives

Les travaux exposés dans cette étude détaillent le développement, la validation et l'application d'un modèle mécanique 3D multi-échelle permettant de prédire l'évolution de l'anisotropie mécanique induite par des OPR cristallines. L'originalité de notre approche repose sur l'utilisation d'une anisotropie mécanique induite et évolutive déterminée à partir d'un calcul complet de la matrice de viscosité macroscopique qu'elle que soit la symétrie cristalline du matériau considéré.

Le couplage physique que nous avons développé repose sur l'intégration d'une loi de comportement polycristalline dans un code EF de type Lagrangien réactualisé. Ce modèle mécanique a été développé pour l'étude de la déformation de la lithosphère continentale. Pour le simplifier, nous avons considéré que celle-ci est constituée à 100% de forstérite, minéral orthorhombique de formule MgSiO_4 .

Dans ce cadre, le modèle VPSC [Molinari *et al.*, 1987; Lebensohn and Tome, 1993] a été retenue comme loi polycristalline et a été couplé au modèle EF 3D Forge2005[®] selon deux méthodes différentes :

- Le couplage fort qui intègre directement la loi polycristalline, et par conséquent l'évolution microstructurale à l'algorithme de résolution du système d'équations mécanique macroscopique,
- Le couplage faible qui utilise les résultats du calcul polycristallin pour la résolution du système d'équations mécanique macroscopique.

Au vu des résultats obtenus lors de la validation sur cas simple (compression de polycristaux d'olivine) de ces deux méthodes de couplage, le couplage faible a été retenu pour l'ensemble de l'étude.

Afin de pouvoir simuler l'influence des zones héritées sur la déformation lithosphérique, deux autres outils numériques ont été utilisés. Un logiciel de maillage multi-domaine, basé sur l'utilisation de fonction *levelset*, permettant de définir au sein du maillage des zones d'OPR d'olivine initiales différentes [Bernacki *et al.*, 2008] et une méthode de transport de variables

utilisé lors d'éventuel remaillage basé sur le concept de particules Lagrangiennes [Bérhinger, 2006; Loge and Chastel, 2006; Beringhier et al., 2007].

L'utilisation de cet outil de calcul pour l'étude de l'influence de la structure héritée sur la déformation de la lithosphère a été menée en deux étapes.

La première partie de notre étude porte sur la simulation de l'extension d'une plaque lithosphérique présentant des OPR de l'olivine homogène. Les résultats obtenus montrent une forte dépendance de l'expression de l'anisotropie mécanique en fonction de l'OPR initiale. L'anisotropie mécanique peut agir sur le régime d'accommodation de la déformation par :

- une évolution du rapport amincissement / raccourcissement de la plaque lithosphérique au cours de l'extension pour l'ensemble des OPR initiales texturées,
- le développement de déformations cisailantes dans les cas où les OPR d'olivine initiales ont des concentrations maximales des axes [100] et [010] obliques par rapport à la direction d'extension,
- la variation du régime d'accommodation de la déformation au cours de l'extension comme par exemple une inversion du sens de cisaillement (c'est notamment le cas pour des OPR d'olivine dont les concentrations maximales initiales des axes [100] et [010] sont respectivement perpendiculaires et alignées sur la direction de l'extension)
- un important écrouissage géométrique (pour des OPR initiales d'olivine dont les concentrations maximales des axes [100] sont alignées sur la direction d'extension).

Ces observations montrent que ces propriétés du comportement rhéologique du matériau ne sont visibles que par la prise en compte de l'anisotropie mécanique induite par l'évolution des OPR d'olivine.

La seconde partie de notre étude porte sur la simulation de l'extension d'une plaque lithosphérique présentant une zone héritée intégrée dans un milieu homogène.

L'analyse de l'influence de la distribution des OPR initiales d'olivine et de leur intensité dans la zone héritée et dans le milieu environnants ainsi que de l'orientation macroscopique de la structure préexistante montre que l'anisotropie mécanique induite par l'évolution des

microstructures d'olivine ouvre de nombreuses pistes pour la compréhension de l'initiation et de la propagation de nombreux processus géologiques (rifting, magmatisme et sismicité intraplaque).

Les résultats montrent que :

- la réactivation des zones de cisaillement préexistantes est favorisée lorsque ces dernières sont obliques à la direction de sollicitation. La réactivation de ces zones est caractérisée par une accommodation de la déformation en transtension (en extension et cisaillement le long de la zone héritée) accompagnée d'une localisation de la déformation qui aboutit à un amincissement de la lithosphère. Ces résultats sont en adéquation avec les phénomènes d'initiation en transtension et de propagation observés dans plusieurs branches du rift Est-Africain [*Theunissen et al.*, 1996; *Bosworth and Strecker*, 1997; *Keranen and Klemperer*, 2008],
- la localisation de la déformation homogène sur l'ensemble de la zone héritée. Cette observation peut expliquer, par exemple, l'observation dérivée à partir de l'analyse des anomalies magmatiques dans l'Atlantique centrale, que l'initiation du rifting s'est produite simultanément sur une distance supérieure à 1000km.
- l'anisotropie viscoplastique est proportionnelle à la concentration initiale des OPR héritées,
- l'évolution progressive des OPR constitutives du milieu environnant peut entraîner, suivant leur nature, une réhomogénéisation de la déformation dans l'ensemble de la plaque, entraînant l'avortement du rift si aucun autre processus physique ne prend le relais.

L'ensemble de ces observations montrent que la prise en compte de l'anisotropie mécanique induite par l'évolution des OPR est un élément clé pour la compréhension de la déformation de la lithosphère. Néanmoins, de nombreux développements restent à accomplir pour pleinement modéliser et comprendre la rhéologie à l'échelle lithosphérique.

Du point de vue numérique, le concept des particules Lagrangiennes permet, outre le transport de variables au cours du remaillage, une réduction du temps de calcul par redistribution partielle des OPR d'olivine. Dans le cas de modèles de type Taylor et pour des matériaux de

haute symétrie, ce concept a été validé et utilisé par Béringhier et al. [Loge et al., 2004; Beringhier et al., 2007]. Pour obtenir une bonne prédiction d'évolution de texture, il est nécessaire de fixer un nombre minimal d'OPR par EF pour minimiser l'erreur commise par la suppression de certaines OPR lors de leur redistribution. Dans le cas de d'une loi polycristalline utilisant un MHE comme le modèle VPSC, il est plus difficile de fixer un nombre minimal d'OPR permettant de conserver, pour n'importe quel type de texture initiale, un comportement mécanique correct du MHE. Une étude poussée est nécessaire pour déterminer si une redistribution partielle des OPR par particules Lagrangiennes peut être appliquée à notre modèle en assurant une bonne fiabilité des résultats et une réduction intéressante du temps de calcul.

Du point de vue physique, il semble nécessaire d'enrichir le code que nous avons développé en y intégrant d'autres processus physiques importants. Tout d'abord, la prise en compte de l'effet des OPR d'olivine sur les transferts de chaleur semble essentiel puisque les monocristaux et polycristaux d'olivine présentent une anisotropie thermique jouant un rôle important sur les transferts de chaleur et, via la dépendance de la viscosité de la température, sur la déformation lithosphérique [Tommasi et al., 2001; Gibert et al., 2003a; Gibert et al., 2003b]. Les processus de recristallisation dynamique sont aussi un paramètre à intégrer pour une meilleure prédiction de l'évolution des OPR d'olivine, et par conséquent de l'anisotropie mécanique, au cours de la déformation.

Références bibliographiques

- Bérhingier, M. (2006), Distribution et transport des variables de modèles polycristallins pour la prédiction de l'anisotropie mécanique des métaux en mise en forme, *Thèse de doctorat, Ecole Nationale supérieure des Mines de Paris, Sophia Antipolis*.
- Beringhier, M., et al. (2007), Using Lagrangian particles to efficiently describe microstructure evolution in metal forming - application to texture-induced mechanical anisotropy, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 15(3), 191-204.
- Bernacki, M., et al. (2008), Level set framework for the numerical modelling of primary recrystallization in polycrystalline materials, *Scripta Materialia*, 58(12), 1129-1132.
- Bosworth, W., and M. R. Strecker (1997), Stress field changes in the Afro-Arabian rift system during the Miocene to Recent period, *Tectonophysics*, 278(1-4), 47-62.
- Gibert, B., et al. (2003a), Thermal diffusivity of olivine single-crystals and polycrystalline aggregates at ambient conditions - a comparison, *Geophysical Research Letters*, 30(22), 5.
- Gibert, B., et al. (2003b), Thermal diffusivity of upper mantle rocks: Influence of temperature, pressure, and the deformation fabric, *Journal of Geophysical Research-Solid Earth*, 108(B8), 15.
- Keranen, K., and S. L. Klemperer (2008), Discontinuous and diachronous evolution of the Main Ethiopian Rift: Implications for development of continental rifts, *Earth and Planetary Science Letters*, 265(1-2), 96-111.
- Lebensohn, R. A., and C. N. Tome (1993), A self-consistent anisotropic approach for the simulation of plastic-deformation and texture development of polycrystals - Application to zirconium alloys, *Acta Metallurgica Et Materialia*, 41(9), 2611-2624.
- Loge, R. E., et al. (2004), Decreasing computation time in finite element simulations coupled with polycrystalline plasticity, in *Materials Processing and Design: Modeling, Simulation and Applications, Pts 1 and 2*, edited by S. Ghosh, et al., pp. 1754-1759, Amer Inst Physics, Melville.
- Loge, R. E., and Y. B. Chastel (2006), Coupling the thermal and mechanical fields to metallurgical evolutions within a finite element description of a forming process, *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 195(48-49), 6843-6857.
- Molinari, A., et al. (1987), A self-consistent approach of the large deformation polycrystal viscoplasticity, *Acta Metallurgica*, 35(12), 2983-2994.

- Theunissen, K., et al. (1996), Mechanisms of inheritance of rift faulting in the western branch of the East African Rift, Tanzania, *Tectonics*, *15*(4), 776-790.
- Tommasi, A., et al. (2001), Anisotropy of thermal diffusivity in the upper mantle, *Nature*, *411*(6839), 783-786.

Résumé

Afin de comprendre l'effet des structures préexistantes sur la déformation des plaques continentales, nous avons développé une méthode de modélisation mécanique multi-échelle utilisant une viscosité anisotrope induite par les Orientations Préférentielles du Réseau (OPR) des cristaux d'olivine présents dans le manteau. Cette méthode en couple le calcul viscoplastique autocohérent de la déformation d'un agrégat d'olivine à un code éléments finis 3D. Elle a été utilisée pour le calcul du comportement mécanique d'une plaque continentale soumise à une extension. Une première série d'expériences numériques sur l'extension de plaque lithosphérique présentant des OPR initiales d'olivine homogènes a permis de montrer que l'anisotropie mécanique macroscopique est fortement dépendante de l'orientation initiale de l'OPR. La seconde série de simulations analyse l'extension d'une plaque continentale présentant une zone présentant des OPR d'olivine héritées d'un événement tectonique précédant. Les résultats de ces calculs multi-domaines que l'anisotropie mécanique de l'olivine peut expliquer la réactivation des zones de cisaillement héritées lors du rifting. Les résultats obtenus dans les deux séries de modèles montrent que l'anisotropie mécanique macroscopique induite par l'évolution des OPR d'olivine dans le manteau supérieur est un paramètre clé pour la compréhension de la déformation des plaques continentales et pour expliquer la réactivation observée de structures tectoniques, tels que les grands décrochements, lors des épisodes tectoniques ultérieurs.

Mots clés : Anisotropie, Olivine, déformation viscoplastique, fluage dislocation, orientation préférentielle du réseau (OPR), texture, héritage structural, plaque continentale, lithosphère, modélisation numérique, éléments finis.

Abstract

To understand the effect of inherited lithospheric structures on the continental plates deformation process, we have developed a multi scale model that explicitly takes into account an anisotropic viscosity due to the Crystal Preferred Orientation (CPO) of olivine in the mantle by coupling a viscoplastic self-consistent simulation of the deformation at the polycrystalline aggregate to a 3D Finite Element code. Using this tool, we calculate the mechanical behavior of a continental lithosphere submitted to extension for various initial structures. The first set of experiments investigates the deformation of a plate with a homogeneous initial olivine CPO. Results show that the macroscopic anisotropy is strongly dependent on the initial orientation of the olivine CPO relative to the solicitation and to its evolution. The second set of experiments aims to analyze the deformation of a continental plate containing pre-existing lithospheric scale shear zones. These multi-domain models show that the olivine mechanical anisotropy may induce the reactivation of pre-existing lithospheric scale shear zones in a plate submitted to rifting. In both cases, the results shows that the macroscopic mechanic anisotropy induced by the evolution of olivine CPO in the upper mantle is a key parameter to understand the deformation of the continental plates and to explain the observed reactivation of inherited structure from past tectonics events.

Keywords: Anisotropy, olivine, viscoplastic deformation, dislocation creep, crystal preferred orientations, texture, reactivation, structural inheritance, continental plates, lithosphere, numerical modeling, finite element.